

Vagner Zeizer Carvalho Paes

Simulação de Ciclos de Histerese Magnética de Filmes Finos de MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111)

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Dante Homero Mosca

Curitiba

2012

Sumário

Sumário	ii
Lista de Figuras	iv
Lista de Tabelas	viii
Resumo	1
Abstract	2
1 Introdução e Motivação	3
2 Fundamentação Teórica	7
2.1 Anisotropia magnética	7
2.1.1 Interação Zeeman	8
2.1.2 Anisotropia magnetocristalina	9
2.1.2.1 Sistema hexagonal	9
2.1.2.2 Sistema cúbico	10
2.1.3 Anisotropia de Superfície	11
2.1.4 Anisotropia de forma	12
2.1.4.1 Esferóide prolato	12
2.1.4.2 Prisma retangular	13
2.1.5 “Overskewing” de ciclos de histerese magnética	14
2.1.6 Magnetoelasticidade e magnetostricção	15
2.1.6.1 Sistema hexagonal	15
2.1.6.2 Sistema cúbico	16
2.1.6.3 Regime não-linear dos acoplamentos magnetoelásticos . . .	16
2.1.7 Efeitos de segunda-ordem	16
2.1.7.1 Distorção hexagonal e ortorrômbica	17
2.1.8 Tensão induzida por campo magnético	17
2.1.9 Contribuição da deformação da rede cristalina induzida por campo magnético para a anisotropia magnética	18
2.1.10 Modelo de Stoner-Wohlfarth	19

3	MnAs e epicamadas de MnAs/GaAs	25
3.1	Propriedades de filmes massivos de MnAs	25
3.1.1	Filmes Finos de MnAs/GaAs	27
3.1.1.1	Epicamadas de MnAs/GaAs(001)	28
3.1.1.2	MnAs/GaAs(001) vicinal	31
3.1.1.3	Epicamadas de MnAs/GaAs(111)	32
3.2	Crescimento de epicamadas de MnAs	36
3.2.1	Crescimento de amostras	36
4	Resultados e discussões	38
4.1	Modelagem para epicamadas de MnAs	38
4.2	Procedimento das simulações	40
4.3	Modelagem para epicamadas de MnAs/GaAs(001)	41
4.3.1	Modelagem para epicamadas de MnAs/GaAs(111)	42
4.4	Metodologia e parâmetros utilizados	42
4.5	Resultados e discussão das simulações das epicamadas de MnAs	45
4.6	Comparação entre as energias de anisotropia	54
4.7	Sucesso da modelagem	55
4.8	Possíveis melhorias no modelo	56
5	Conclusões	57
	Apêndice	59
A	Contribuição da deformação da rede cristalina para a anisotropia magnética	59
A.1	Introdução	59
A.2	Sistema hexagonal	61
A.2.1	Estado de deformação geral	61
A.2.1.1	Equações de mínimo	61
A.2.1.2	Anisotropia magnética induzida	62
A.2.2	Deformação biaxial	63
A.3	Sistema cúbico	64
A.3.1	Deformação geral	65
A.3.1.1	Equações de mínimo	65
A.3.1.2	Anisotropia induzida	65
A.3.2	Deformação biaxial	66
A.3.2.1	Equações de mínimo	66
A.3.2.2	Anisotropia induzida	67
A.4	Aplicações	68
A.5	Comentários finais	71
B	Trabalhos originados	72
B.1	Artigos submetidos para publicação	72
B.2	Resumos publicados em anais de congressos	72
	Referências Bibliográficas	73

Lista de Figuras

1.1	Histograma mostrando o número de <i>papers</i> de MnAs publicados por ano. .	4
2.1	Representação da estrutura cristalina hexagonal hcp.	8
2.2	Magnetização e campo magnético externo definidos em termos de coordenadas esféricas.	9
2.3	Curva de histerese típica para o Co com simetria hexagonal	10
2.4	Curvas de histerese típica para um sistema com simetria cúbica.	11
2.5	Um elipsóide de dimensões a , b e c	13
2.6	Prisma retangular de dimensões a , b e c	13
2.7	Exemplos de “Overskewing”	14
2.8	Nesta figura é demonstrado o fenômeno físico de “field-induced stress” . . .	18
2.9	Ciclo de histerese característico de uma partícula esferoidal ferromagnética. Aqui θ e ϕ correspondem aos ângulos que a magnetização e o campo externo fazem com o eixo de anisotropia. M_s é a magnetização de saturação, M_r é a magnetização remanente e H_c é o campo coercivo da partícula esferoidal.	20
2.10	Ciclos de histerese conforme o modelo de Stoner-Wohlfarth para diversos valores do ângulo que o campo magnético faz com o eixo de anisotropia. O ciclo de histerese para o ângulo de 0° tem reversão de magnetização abrupta em $H/H_K = 1$, assemelhando-se a uma curva de histerese magnética para um eixo de fácil magnetização. A curva para o ângulo de 90° mostra a magnetização sendo coerentemente rotacionada, digamos, da direção “+ z ” para a direção “- z ”, apresentando magnetização remanete e campo coercivo nulos. Para ângulos entre 0° e 90° a histerese se dá como uma mistura de reversão coerente e saltos abruptos da magnetização.	21
2.11	Nesta figura é mostrado um esquema elegante para mostrar como a energia livre magnética total de um sistema magnético varia mediante a variação do campo magnético aplicado e da configuração de mínimo da magnetização. Note que a magnetização está em um mínimo correspondente a $\theta = 0$ para $H \leq H_c$, tendo um salto abrupto para $\theta = \pi$ em $H > H_c$. Dizemos que foi necessário que a magnetização vença uma barreira de energia para que seja possível a sua reversão da direção $\theta = 0$ para $\theta = \pi$	22

2.12	Astróide do modelo de Stoner-Wohlfarth (esquerda) e representação da partícula em mínimos de energia livres ao longo dos eixos fácil e uma direção de magnetização intermediária (direita). Ciclos de histerese conforme o modelo de Stoner-Wohlfarth assumem formas bem diferentes para diversos valores do ângulo que o campo magnético faz com o eixo de anisotropia. Adaptado da internet de sítio desativado.	23
2.13	Exemplo de “crossover” do ciclo de histerese para o modelo de Stoner-Wohlfarth. Tal ocorrência ocorre quando aplicamos campos magnéticos fazendo um ângulo com o eixo de anisotropia maior que $76,72^\circ$ e menor do que 90° . Conforme mostrado nesta figura, os ciclos são interpenetrantes próximo à saturação da magnetização	24
3.1	Fase ferromagnética de filmes massivos de MnAs que consiste de células hexagonais, as quais consistem de planos de Mn com As alternados.	25
3.2	Esquema para mostrar a fase β do MnAs, a qual pode ser vista como uma rede hexagonal distorcida e, portanto, pode ser considerada como uma rede ortorrômbica.	26
3.3	À esquerda é mostrado o diagrama $M \times T$ para a transição de fase do MnAs.	27
3.4	(a) Estrutura cristalina tipo NiAs para a fase ferromagnética do MnAs consistindo de planos hexagonais de Mn e As. (b) Estrutura cristalina do MnAs com uma célula unitária ortorombicamente distorcida.	28
	(a)	28
	(b)	28
3.5	Relação de epitaxia do MnAs sobre o substrato de GaAs no caso MnAs/GaAs(001). As setas grandes azuis indicam a existência de um campo de tensão compressiva no plano dos filmes.	28
3.6	Estrutura de domínios tipo-stripe para o MnAs/GaAs(001). É mostrada a orientação dos “stripes” em relação a estrutura cristalina do MnAs. Temos listras cinzas denotando a fase ferromagnética e listras cinza claro denotando a fase paramagnética do MnAs. Aqui w_α é a largura das “stripes” ferromagnéticas e w_β é a largura das “stripes” da fase paramagnética. O curioso é que p , o período entre as fases ferro e paramagnéticas, não depende da temperatura, mas somente da espessura do filme.	29
3.7	Domínios epitaxiais observados em epicamadas MnAs/GaAs(001), conforme Ref. [http://www.pdi-berlin.de/research/core-research/ferromagnet-semiconductor-hybrid-structures/spin-injection/mnas-gaas]. Temos domínios A que foram bem crescidos e apresentam uma boa cristalinidade, enquanto que domínios B correspondem ao caso de partes mal crescidas no filme.	30
3.8	Magnetização sob resfriamento em campo magnético como função da temperatura. Também são mostrados ciclos de histerese magnética medidos com o campo aplicado ao longo do eixo fácil para diversas temperaturas indicadas por setas coloridas ao longo da curva de magnetização versus temperatura.	31
3.9	Ciclos de histerese magnética para o MnAs/GaAs(001). O campo magnético foi aplicado ao longo de diferentes direções cristalográficas a temperatura ambiente. A direção b^* corresponde a direção normal à superfície do filme. No inset da figura é mostrado o campo de tensão que o MnAs está submetido neste caso.	32

3.10	Comportamento da componente da magnetização de um filme de MnAs/GaAs(001) sob campo magnético aplicado no plano	33
3.11	Exemplo de superfície vicinal de um substrato onde átomos são depositados. Os terraços atômicos de larra “l” tendem a favorecer a epitaxia de um filme.	33
3.12	Curvas de magnetização para o MnAs vicinal para o eixo intermediário de magnetização. Somente um ramo de saturação é mostrado.	34
3.13	Relação de epitaxia do MnAs sobre o substrato de GaAs no caso MnAs/GaAs(111). As setas grandes vermelhas indicam a existência de um campo de tensão compressiva no plano dos filmes.	34
3.14	Dependência com a temperatura da magnetização sob resfriamento medida a campos de 3 kOe. Também são mostrados ciclos de histerese magnética medidos com o campo aplicado ao longo do eixo fácil para três temperaturas assinaladas por setas na curva da magnetização versus temperatura.	35
3.15	Ciclos de histerese magnética para o MnAs/GaAs(111)B. O campo magnético foi aplicado ao longo de diferentes direções cristalográficas a temperatura ambiente. Podemos notar que temos um plano de fácil magnetização (correspondendo a $H//a$ ou $H//b$) e um eixo de difícil magnetização correspondendo a campos aplicados ao longo da direção c . O inset da figura mostra o campo de tensão que o MnAs neste caso está submetido, que é biaxial.	36
4.1	Vista lateral dos domínios α e β presentes em uma amostra de MnAs/GaAs(001). A figura mostra as “stripes” α e β do MnAs. A fase α e β do MnAs são consideradas como sendo ferromagnética e paramagnética, respectivamente. Como a fase β do MnAs é paramagnética, ela não contribui para a resposta magnética total do sistema a baixos campos. Então, com intuito de modelar a histerese magnética, podemos considerar o filme como um monodomínio ferromagnético homogêneo.	39
4.2	Vista lateral dos domínios α e β presentes em uma amostra de MnAs/GaAs(111)B. A figura mostra como se dispõem as fases α e β . Observe que temos fases β dispostas em forma de agulha ao longo do filme. A fase α e β do MnAs são consideradas como sendo ferromagnética e paramagnética, respectivamente. Como a fase β do MnAs é paramagnética, ela não contribui para a resposta magnética total do sistema a baixos campos. Então, com intuito de modelar a histerese magnética, podemos considerar o filme como um monodomínio ferromagnético homogêneo.	40
4.3	Simulações obtidas usando um modelo de Stoner-Wohlfarth	41
4.4	Dependência com a temperatura dos parâmetros de rede	45
4.5	Dependência com a temperatura dos parâmetros de rede	46
4.6	Ciclos de histerese obtidos com o campo magnético externo aplicado ao longo do eixo fácil de magnetização de epicamadas de MnAs/GaAs(001) para duas temperaturas: (a) 270 K e (b) 300 K. Círculos vermelhos são dados experimentais e as linhas cheias são os resultados das simulações. . .	47

4.7	Ciclos de histerese magnética obtidos com o campo magnético aplicado ao longo do eixo de difícil magnetização de epicamadas de MnAs/GaAs(001) para três temperaturas: (a) 270 K, (b) 300 K, and (c) 310 K. Círculos vermelhos são os dados experimentais e as linhas cheias são os resultados das simulações.	48
4.8	Curva de magnetização e a respectiva simulação obtida para o campo magnético aplicado paralelo ao eixo intermediário. A linha cheia corresponde à simulação, enquanto que os círculos vermelhos são os dados experimentais. Note que a simulação teórica dá uma remanência nula, enquanto que o dado experimental dá uma remanência diferente de zero. Tal remanência não nula medida experimentalmente é devida a existência da componente fora do plano e de domínios B na amostra.	49
4.9	Ciclos de histerese obtidos para epicamadas de MnAs/GaAs(111) a 300 K com o campo magnético aplicado no eixo magneticamente (a) difícil e (b) fácil. Círculos vermelhos são dados experimentais e as linhas cheias são os resultados das simulações.	52

Lista de Tabelas

4.1	Magnetização de saturação, M_s , constantes de anisotropia magnetocristalinas de primeira e segunda ordem,	43
4.2	Valores das constantes de acoplamento magnetoelástico (B_i) para o MnAs obtidos por ajuste de curvas. O valor experimental da curva de tensão induzida por campo ($\Delta\sigma_{i,exp}^j$) e o calculado pelo nosso modelo ($\Delta\sigma_{i,model}^j$) são mostrados. Aqui $\Delta\sigma_a^b$ ($\Delta\sigma_a^c$) corresponde a variação de tensão necessária para girar a magnetização do eixo fácil para o eixo intermediário (eixo difícil).	43
4.3	Valores das deformações para epicamadas de MnAs sobre GaAs	44
4.4	Comparação entre as energias relevantes ao sistema antes e durante a transição de fase magnetoestrutural. Os valores da interação Zeeman E_{zee} na saturação, das constantes de anisotropia magnetocristalina de primeira ordem K_1 e K_2 , da energia desmagnetizante E_{deg} e da energia magnetoelástica E_{magel} são mostrados para o MnAs/GaAs(111)B para o seu eixo de difícil magnetização para duas temperaturas.	54
4.5	Comparação entre as energias relevantes ao sistema antes e durante a transição de fase magnetoestrutural. Os valores da interação Zeeman E_{zee} na saturação, das constantes de anisotropia magnetocristalina de primeira ordem K_1 e K_2 , da energia desmagnetizante E_{deg} e da energia magnetoelástica E_{magel} são mostrados para o MnAs/GaAs(001) para o seu eixo de difícil magnetização para duas temperaturas.	55
4.6	Comparação entre as energias relevantes ao sistema antes e durante a transição de fase magnetoestrutural. Os valores da interação Zeeman E_{zee} na saturação, das constantes de anisotropia magnetocristalina de primeira ordem K_1 e K_2 , da energia desmagnetizante E_{deg} e da energia magnetoelástica E_{magel} são mostrados para o MnAs/GaAs(001) para o seu eixo intermediário de magnetização para duas temperaturas.	55
A.1	Acoplamentos magnetoelásticos	69
A.2	Acoplamentos magnetoelásticos	69
A.3	Constantes de anisotropia magnetocristalina em primeira e segunda ordem K_1^{Ga} e K_2^{Ga}	69

"For a physicist, mathematics is not just a tool by means of which phenomena can be calculated, it is the main source of concepts and principles by means of which new theories can be created."

Freeman Dyson

"Time travels ind divers paces with divers persons. I'll tell you who Time ambles withal, who Time trots withal, who Time gallops withal, and who he stands still withal."

William Shakespeare, As You Like It

RESUMO

Nesta dissertação de mestrado é apresentado um estudo detalhado do comportamento magnético anisotrópico de epicamadas de MnAs crescidas por feixe de epitaxia molecular sobre substratos de GaAs(001) e GaAs(111)B. Medidas de magnetização à temperatura ambiente revelaram que as epicamadas de MnAs tem uma forte anisotropia magnética. No caso das epicamadas MnAs/GaAs(001), a direção de magnetização fácil ocorre no plano dos filmes ao longo da direção cristalográfica [110] dos filmes finos MnAs que é paralela a direção [110] do substrato de GaAs. Observa-se ciclos de histerese quase retangulares com magnetização remanente relativamente alta e campo coercivo baixo. No caso das epicamadas MnAs/GaAs(111)B, o plano basal hexagonal do MnAs está contido no plano de filme e corresponde a um plano de magnetização fácil. A deformação da célula unitária do MnAs devido a efeitos de tensão residual é amplamente conhecida na literatura. A diferença nos coeficientes de expansão térmica do MnAs e do GaAs combinado a efeitos de tensão induzida pela aplicação do campo magnético tornam a transição de fase magnetoestrutural do MnAs bastante complexa. Em particular a coexistência das fases ferromagnética e paramagnética nessas epicamadas difere significativamente daquela observada no caso do MnAs massivo. É proposto um modelo baseado na rotação coerente da magnetização para simular os ciclos de histerese magnética de epicamadas de MnAs em temperaturas ao redor da transição de fase magnetoestrutural. A partir dos resultados das simulações é demonstrado que as contribuições das energias magnetoelásticas e magnetostrictivas para a densidade de energia livre são cruciais para corretamente descrever a magnetização de ambos os tipos de epicamadas de MnAs. A magnetização foi obtida para campos magnéticos aplicados em diferentes temperaturas e orientações relativas à rede cristalina do MnAs a partir de procedimentos padrões de minimização da densidade de energia livre magnética. Parâmetros fenomenológicos foram usados nos termos de energia de anisotropia magnética em diferentes temperaturas. Utilizamos como variáveis livres nas simulações somente as constantes de acoplamento magnetoelásticas do MnAs. Os coeficientes de acoplamento magnetoelástico obtidos são compatíveis com valores previamente medidos para o MnAs e contribuem significativamente para os termos de primeira ordem e segunda ordem da anisotropia magnética. Os resultados das nossas simulações são consistentes também com a manifestação de uma componente de magnetização fora do plano do filme de MnAs sobre substratos de GaAs(001). Essa componente de magnetização perpendicular já foi observada e relatada. O presente modelo indica que ela é induzida por efeitos de tensão durante a coexistência de fases e que persiste em temperaturas acima da temperatura de Curie da componente de magnetização no plano.

ABSTRACT

In this work we present a detailed study on the anisotropic magnetic behavior of MnAs epilayers grown by molecular beam epitaxy on GaAs(001) and GaAs(111)B substrates. Room temperature magnetization measurements show that MnAs epilayers exhibit a strong magnetic anisotropy. In the case of MnAs/GaAs(001) epilayers, the direction of easy magnetization is along the crystallographic axis [110] of MnAs films which is parallel to [110] axis of the GaAs substrate. Almost rectangular hysteresis loops are observed with relatively high remanent magnetization and low coercive field. In the case of MnAs/GaAs(111)B epilayers, the basal plane of hexagonal MnAs lies in the film-plane and corresponds to an easy-plane of magnetization. The deformation of the unit cell of MnAs due to residual stress effects is well-known in the literature. The difference between the thermal expansion coefficients of MnAs and GaAs combined with stress effects induced by application of magnetic field results in rather complex magnetostructural phase transition for MnAs. In particular, the coexistence of ferromagnetic and paramagnetic phases in these epilayers differs significantly from that observed in bulk MnAs. We propose a model based on coherent rotation of magnetization to simulate magnetic hysteresis loops of MnAs epilayers for temperatures around the magnetostructural phase transition. Our simulation results demonstrate that magnetoelastic and magnetostrictive energy contributions to the magnetic free energy density are crucial to correctly describe the magnetization of both kinds of MnAs epilayers. We obtained magnetization from standard minimization procedure of the free magnetic energy density under applied magnetic field at different temperatures and orientations relative to crystallographic axis of MnAs. Phenomenological parameters were used in the magnetic anisotropy energies for several temperatures. As free parameters in our simulations there were used only magneto-elastic coupling and second-order anisotropy constants of MnAs. The magneto-elastic coupling constants resulting from the simulations are in good agreement with values previously measured for MnAs and significantly contribute to first- and second-order magnetic anisotropy energies. Our simulation results are also consistent with an out-of-plane magnetization component for MnAs on GaAs(001) substrates. Such out-of-plane magnetization component was already reported. Our present model indicates that the out-of-plane component is induced by stress during phase coexistence, persisting in temperatures above the Curie temperature of the in-plane magnetization component.

Introdução e Motivação

Um grande avanço em direção a uma spintrônica semicondutora eficaz é a integração de filmes ferromagnéticos exibindo temperatura de Curie acima da temperatura ambiente com substratos semicondutores.

Arseneto de manganês (MnAs) é um dos poucos compostos ferromagnéticos que pode ser crescido epitaxialmente sobre superfícies de GaAs e Si [1]. Filmes ferromagnéticos de MnAs tem sido estudados a mais de um século por apresentar propriedades interessantes.

Filmes finos de MnAs, dentre os quais MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111), tem atraído a atenção da comunidade científica por apresentar:

- resposta magnética a temperatura ambiente e acima dela [2];
- efeito magnetocalórico colossal com aplicações na área de microeletrônica [3–5];
- componente perpendicular de magnetização com aplicações em magnetológica [6, 7] e armazenamento em memória de disco rígido [8, 9];
- resposta magnetoelástica gigante [10, 11], sendo importante para possíveis aplicações em transdutores e sensores magneticamente ativados [11];
- aplicação como eletrodo ferromagnético injetor de corrente polarizada por spin em GaAs, com o qual tem compatibilidade de parâmetro de rede e compatibilidade química por não apresentar reatividade interfacial [12–14].

No entanto, apesar de um século de pesquisas, muitas questões ainda estão em aberto. Entre elas está a descrição de algumas peculiaridades do processo de magnetização e da histerese magnética de filmes finos magnéticos. A histerese magnética de epicamadas de MnAs foi previamente estudada por outros grupos [15, 16], tendo sido modelada para alguns casos particulares sem levar em conta a existência de interações magnetoelásticas.

Um modelo geral capaz de modelar ambas as epicamadas de MnAs, sendo válido para uma ampla faixa de temperatura e para várias direções cristalográficas, ainda não tinha sido feito até a confecção do presente trabalho. O sucesso de nossa modelagem reside no fato da inclusão das interações magnetoelásticas e o impacto da deformação nas curvas de histerese. O efeito da deformação da rede cristalina nas propriedades estruturais do MnAs foi tema de trabalhos anteriores [15, 17]. Recentemente, foi proposta uma complexa relação entre a deformação da rede e as propriedades magnéticas nos filmes de MnAs e uma forte dependência das constantes magnetocristalinas de primeira e segunda ordem, K_1 e K_2 , e a Temperatura de Curie da amostra, T_c , no ângulo e fração da componente fora do plano [15, 18] foi estabelecida. No entanto, neste trabalho exploramos a influência da deformação da rede como uma fonte de anisotropia magnética.

Tendo em vista o MnAs exibir tantas propriedades magnéticas interessantes para aplicações tecnológicas, inúmeros estudos vem sendo realizados para descrever e compreender os efeitos da redução da dimensionalidade em filmes finos, grânulos e aglomerados de MnAs.

Uma busca pelo tema MnAs na base de dados do Web of Science, disponibilizada pela CAPES, revela um crescimento acelerado de publicações nos últimos anos. A Fig. 1.1 exibe um gráfico do número de artigos publicados sobre MnAs nos últimos 30 anos.

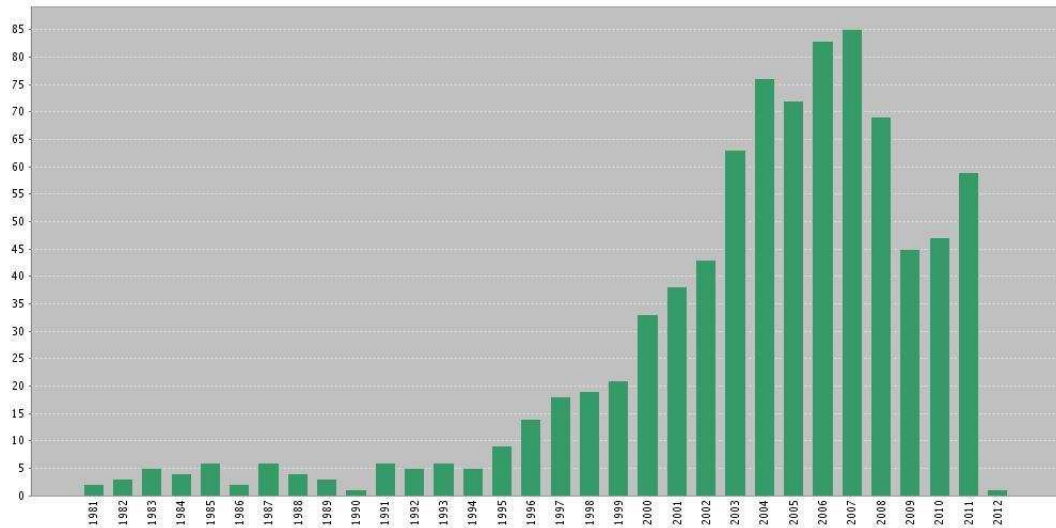


Figura 1.1: Histograma mostrando o número de *papers* de MnAs publicados por ano.

Um volume tão significativo de publicações reflete o interesse nesse material. Nessas publicações temos tanto modelagens teóricas de primeiros princípios e fenomenológicas sobre as propriedades físicas, como estudos dedicados a demonstração de várias aplicações tecnológicas.

Apesar disso, desconhecemos até a presente data aplicações tecnológicas comerciais baseadas em propriedades magnéticas do MnAs.

Nessa dissertação são estudados filmes finos cristalinos de MnAs crescidos sobre

substratos de GaAs que preservam com este último relações epitaxiais. Ou seja, apresentam relações de simetria bem definidas entre planos cristalinos das redes cristalinas hexagonal do MnAs e cúbica tipo zincoblenda do GaAs. Nesse caso, os depósitos de MnAs são denominados epicamadas ou heteroestruturas MnAs sobre GaAs.

Foram investigados dois tipos de epicamadas de MnAs ferromagnéticas. O primeiro tipo são as epicamadas MnAs sobre GaAs(111) que possuem a estrutura hexagonal com a base hexagonal paralela ao plano cristalino (111) do GaAs. O segundo tipo são as epicamadas de MnAs sobre GaAs(001) que possuem a estrutura hexagonal do MnAs com o plano basal perpendicular ao plano (001) do GaAs. Nesse caso, ocorre uma deformação nas distâncias interplanares paralelas ao plano dos filmes. A rigor, a rede hexagonal do MnAs passa a ser ortorrômbica devido aos efeitos de distorção e deformação.

Ambos os tipos de epicamadas MnAs/GaAs estudados nesse trabalho foram crescidos no laboratório do Dr. Victor Etgens do Institut de NanoSciences de Paris, uma unidade mista de pesquisa vinculada ao CNRS e a Université Pierre et Marie Curie.

Nesse trabalho de mestrado foram desenvolvidas modelagens do processo de magnetização das epicamadas de MnAs/GaAs a partir de expressões de energia livre magnética. O nosso modelo, consistindo de uma implementação do famoso modelo de Stoner-Wohlfarth, introduz a rotação coerente da magnetização como o mecanismo de histerese dos nossos filmes. Nossa abordagem é simplória no sentido que dinâmica de paredes de domínio não são levadas em conta. Consideraremos os termos de energia magnética mais relevantes necessários na energia livre magnética para a obtenção da curva de magnetização em função do campo magnético aplicado e da temperatura, buscando sempre consistência com os resultados experimentais relatados por outros grupos de pesquisa.

Excelente acordo entre as simulações e os ciclos de histerese medidos foram obtidos utilizando-se parâmetros experimentais previamente determinados em outras publicações. Nesse sentido, a abordagem utilizada é semi-fenomenológica. A inclusão de interações magnetoelásticas se mostraram fundamentais para obter uma descrição consistente dos resultados experimentais. Em especial, um grande aumento das constantes de magnetoacoplamento e o aparecimento de uma componente de magnetização perpendicular, ambos relatados por outros grupos de pesquisa, são consistentes com a nossa modelagem. Resaltamos que o modelo apresentado é o modelo mínimo, sendo que a não inclusão de qualquer um dos termos compromete os resultados por nós obtidos.

Tanto as amostras utilizadas como as caracterizações magnéticas por técnicas de magnetometria foram realizadas independentemente e previamente a esse trabalho de mestrado.

Nesse trabalho de mestrado foram desenvolvidas e discutidas modelagens e simulações computacionais. Sempre que possível, expressões algébricas foram deduzidas a partir da expressão da densidade de energia livre magnética utilizando os procedimentos padrões de método de minimização de energia.

A abordagem semi-fenomenológica permitiu obter uma descrição auto-consistente para os processos de magnetização distintos observados nos dois tipos de epicamadas de MnAs/GaAs, a saber epicamadas de MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111)B, isto é, epicamadas de MnAs submetidas no plano do filme a tensões compressivas da célula hexagonal do MnAs ora uniaxiais perpendicular ao plano basal (correspondendo às epicamadas de MnAs/GaAs(001) [19]) e ora biaxiais no plano basal (correspondendo às epicamadas de MnAs/GaAs(111)B [13]).

Esta dissertação foi redigida com a seguinte estrutura de capítulos. Esse Capítulo 1 apresenta a introdução e a motivação do trabalho.

O Capítulo 2 apresenta uma fundamentação teórica que descreve a construção da expressão da energia livre magnética. Além disso, descreve a obtenção das curvas de magnetização a partir da energia livre magnética.

O Capítulo 3 descreve as propriedades magnéticas e estruturais do MnAs para filmes massivos e epicamadas. São discutidos os sistemas MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111) através de uma breve abordagem das relações de epitaxia do MnAs sobre o GaAs para cada caso. A configuração de domínios para cada sistema e as características peculiares de cada sistema necessárias para a compreensão deste trabalho são abordados. É apresentada uma breve descrição de como epicamadas de MnAs são crescidas utilizando métodos experimentais.

O capítulo 4 descreve a construção do modelo para simular o comportamento magnético de epicamadas de MnAs, juntamente com a metodologia usada, parâmetros utilizados e os resultados obtidos juntamente com discussões.

O capítulo 5 apresenta as principais conclusões obtidas neste trabalho.

O Apêndice A apresenta os nossos resultados para a contribuição da deformação da rede cristalina para a anisotropia magnética de sistemas com simetria hexagonal. Para destacar da influência dos efeitos magnetoelásticos frente a simetria cristalina, incluímos em nossa análise também ligas de Fe-Ga que possuem simetria cúbica e grandes coeficientes magnetoelásticos. Em especial analisamos estados de deformações associados a um estado de deformação geral e biaxial, efetuando a correção a anisotropia magnética da distorção do parâmetro de rede mediante a aplicação de campo magnético externo. Apresentamos também aplicações de tais correções a sistemas reais, mostrando então sua relevância para descrever as fontes anisotrópicas de sistemas reais.

O apêndice B apresenta os trabalhos originados ao longo da confecção do presente trabalho de mestrado.

Fundamentação Teórica

Neste capítulo apresentaremos a fundamentação teórica para a modelagem do processo de magnetização de epicamadas de MnAs. Começaremos mostrando as fontes de anisotropia magnética para um sistema ferromagnético, em seguida mostraremos considerações teóricas sobre o que ocorre em tais sistemas sob ação de campo magnético externo. A seguir mostraremos um modelo simples e eficaz para descrever a histerese de sistemas magnéticos, o famoso modelo de Stoner-Wohlfarth (SW) [20]. Tal modelo descreve a histerese magnética de um conjunto de partículas monodomínio não interagente.

2.1 Anisotropia magnética

Nesta seção apresentaremos as principais fontes de anisotropia magnética e fenômenos físicos relacionados.

Materiais ferromagnéticos apresentam uma orientação preferencial para a magnetização espontânea, ou seja, há uma anisotropia magnética no sistema. Em termos energéticos dizemos que existe uma direção mais favorável para o alinhamento da magnetização. Tal direção favorável pode ser induzida por:

- aplicação de campo magnético externo,
- manifestação do efeito spin-órbita através de uma anisotropia magnetocristalina,
- efeito desmagnetizante, dependente da geometria da amostra,
- efeitos de deformação magnetomecânica, esta sendo devida a campos de tensão no filme,
- efeitos de superfície, relacionados a dimensionalidade do filme.

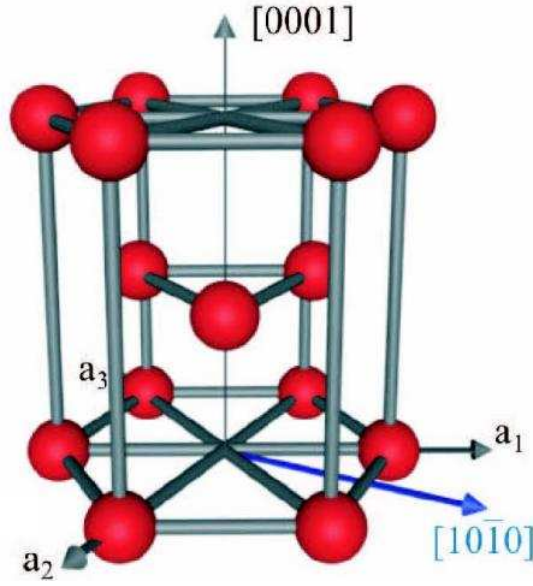


Figura 2.1: Representação da estrutura cristalina hexagonal hcp.

Neste capítulo restringimos o estudo da anisotropia magnética para sistemas com estrutura cristalina do tipo hexagonal, conforme mostrado na Fig. 2.1, e sistemas com simetria cúbica.

2.1.1 Interação Zeeman

A interação Zeeman, F_z , é a parte da energia livre magnética que leva em conta a interação entre o campo magnético externo e a magnetização da amostra. Sua origem física está no acoplamento do momento magnético total (spin e orbital) por unidade de volume do material, \vec{M} , com o campo magnético, \vec{H} [21]. Ela favorece um alinhamento entre o campo magnético e a magnetização, sendo descrita por:

$$F_z = -\vec{M} \cdot \vec{H}. \quad (2.1)$$

Nas coordenadas esféricas da Fig. (2.2), a interação Zeeman é escrita como:

$$F_z = -M_s H [\sin \theta_H \sin \theta_M \cos(\phi_M - \phi_H) + \cos \theta_H \cos \theta_M]. \quad (2.2)$$

Aqui M_s é a magnetização de saturação, θ_H e θ_M são os ângulos entre o campo externo, H , e a magnetização com respeito ao eixo z , ϕ_H e ϕ_M são os respectivos ângulos no plano do filme. Por simplicidade, daqui em diante denotaremos os ângulos esféricos da magnetização, θ_M e ϕ_M , simplesmente por θ e ϕ .

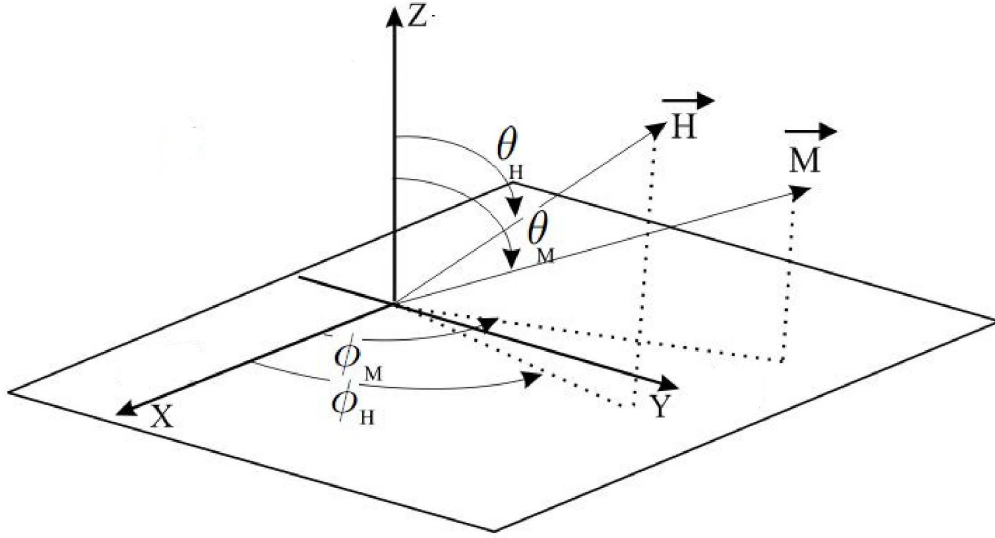


Figura 2.2: Magnetização e campo magnético externo definidos em termos de coordenadas esféricas. θ_M e ϕ_M são os ângulos esféricos da magnetização, enquanto que θ_H e ϕ_H são os ângulos esféricos do campo magnético aplicado.

2.1.2 Anisotropia magnetocristalina

Em materiais ferromagnéticos há uma contribuição magnetocristalina. A origem física de tal interação está no acoplamento spin-órbita que é forte o suficiente para induzir uma orientação preferencial para a magnetização.

2.1.2.1 Sistema hexagonal

A Fig. 2.3 mostra curvas de magnetização versus campo magnético aplicado típicas para determinar a influência da magnetocristalinidade do sistema de um sistema hexagonal. Claramente, o plano basal corresponde a um plano de magnetização difícil. O cobalto metálico é um bom exemplo em que esta situação ocorre.

Conforme Mason [22], baseado em formalismo tensorial e em simetrias, para um cristal com estrutura hexagonal é válida até quarta ordem a seguinte expressão para a energia magnetocristalina, F_c :

$$F_c = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta + K_3 \sin^6 \theta + K_4 \sin^6 \theta \cos 6\phi. \quad (2.3)$$

Na equação acima K_1 , K_2 e K_3 são as anisotropias magnetocristalinas de primeira, segunda e terceira ordem, respectivamente, enquanto que K_4 é um termo de anisotropia magnetocristalina de quarta ordem que reflete a simetria 6 do hexágono no seu plano basal. Ainda, θ e ϕ são os ângulos esféricos definidos a partir do eixo c do hexágono (ou paralelamente ao eixo [0001], conforme mostrado na Fig. 2.1)

No entanto para uma descrição adequada do comportamento magnético usamos

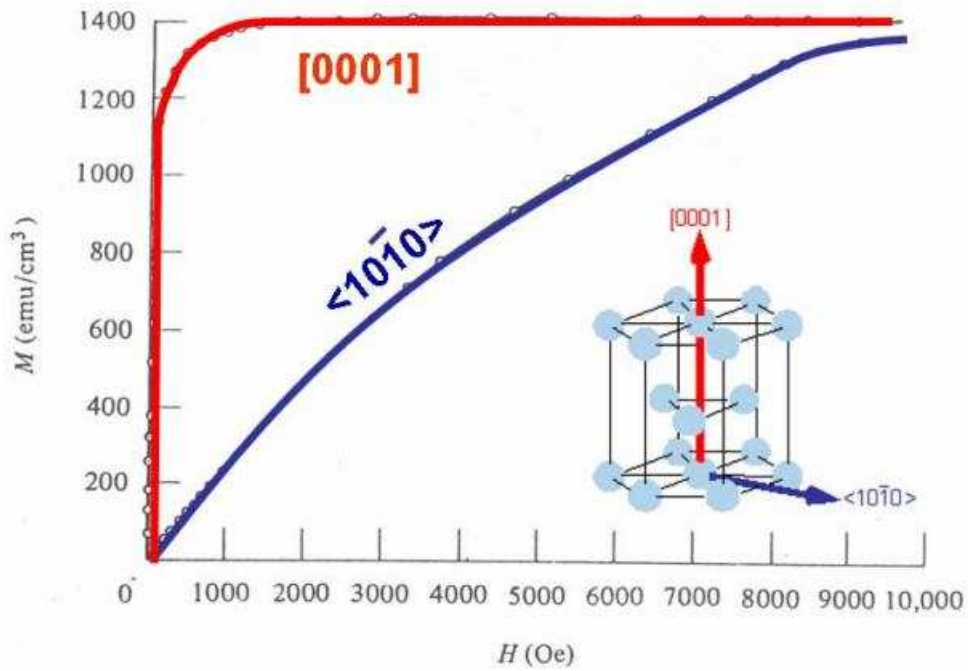


Figura 2.3: Curva de histerese típica para o Co com simetria hexagonal. A curva de histerese ao longo da direção [0001] mostra claramente que tal direção corresponde a direção fácil do sistema, sendo necessário campos da magnitude de poucos Oe para saturar a magnetização ao longo desta direção. A curva de histerese ao longo da direção $[10\bar{1}0]$ mostra que tal direção é magneticamente difícil, ou seja, precisamos de campos “grandes”, da ordem de 1 T, para alinha a magnetização ao longo de tal eixo.

termos até segunda ordem:

$$F_c = K_1 \sin^2 \theta + K_2 \sin^4 \theta. \quad (2.4)$$

É interessante analisar o que ocorre quando os valores de K_1 e K_2 relativamente mudam. Quando K_1 é muito maior que K_2 , dizemos que o sistema possui uma anisotropia uniaxial (ou seja, proporcional a $\sin^2 \theta$). Se $K_1 < 0$, então a direção preferencial de alinhamento da magnetização ocorre no plano $\theta = \pi/2$. Se K_2 é consideravelmente maior que K_1 , logo a anisotropia do sistema tem uma contribuição considerável de uma anisotropia biaxial. Nesse caso, se $K_2 < 0$ há uma tendência da magnetização estar espontaneamente alinhada a $\theta = \pi/4$. Um regime interessante é quando $K_1 \leq -2K_2$ que significa que a magnetização espontaneamente está alinhada em um cone cujo ângulo com a vertical é dado por: $\theta = \arcsin(\frac{-K_1}{2K_2})^{1/2}$ [21, 23].

2.1.2.2 Sistema cúbico

A anisotropia magnetocristalina em primeira e segunda ordem para um sistema com simetria cúbica é dada por:

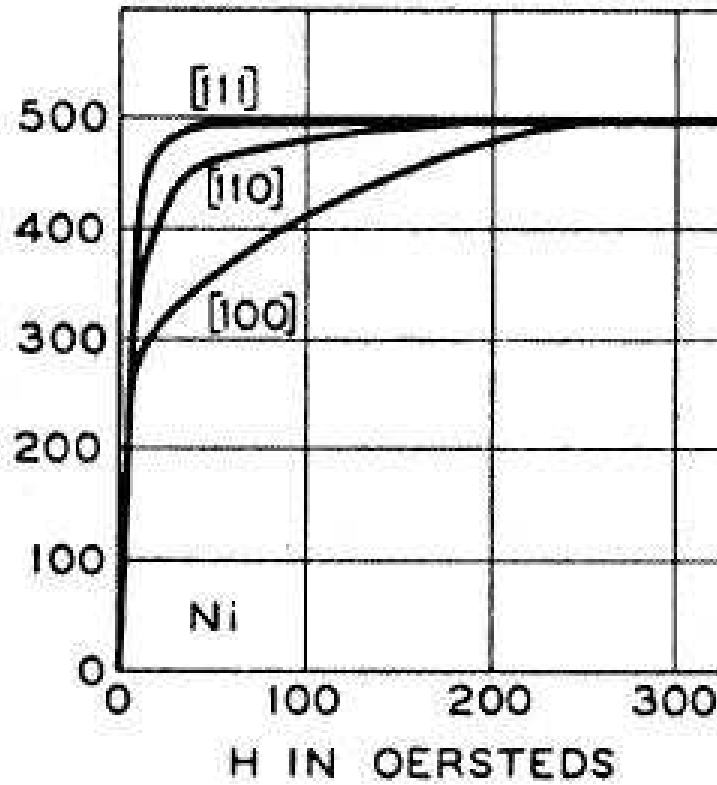


Figura 2.4: Curvas de histerese típica para o Ni com simetria cúbica. As curvas de histerese medidas ao longo das direções [111], [110] e [100] correspondem às direções de magnetização magneticamente fácil, intermediária e difícil, respectivamente.

$$F_c^c = K_{1,c} (\alpha_1^2 \alpha_2^2 + \alpha_2^2 \alpha_3^2 + \alpha_3^2 \alpha_1^2) + K_{2,c} \alpha_1^2 \alpha_2^2 \alpha_3^2, \quad (2.5)$$

aqui α_i são os cossenos diretores, com $\alpha_1 = \sin \theta \cos \phi$, $\alpha_2 = \sin \theta \sin \phi$ e $\alpha_3 = \cos \theta$; $K_{1,c}$ e $K_{2,c}$ são as constantes de anisotropia magnetocristalina em primeira e segunda ordem, respectivamente. Normalmente, só o primeiro termo da equação 2.5 é necessário para uma boa descrição de um sistema cúbico.

A Fig. 2.4 mostra curvas de histerese típicas para um sistema com simetria cúbica.

2.1.3 Anisotropia de Superfície

Em filmes finos existe uma contribuição à anisotropia que surge da quebra de simetria de translação na interface, denominada anisotropia de superfície ou interface [21, 23, 24]. Efeitos de superfície, que são devidos ao tamanho reduzido de uma das dimensões do filme, podem influenciar na anisotropia de um sistema magnético. Em termos energéticos acrescenta-se na energia livre uma energia por unidade de volume, E_s , dada por:

$$E_s = \frac{1}{t} K_s \cos^2 \theta. \quad (2.6)$$

Na expressão acima K_s é a constante de anisotropia superficial para fora do plano e t é a espessura do filme.

A anisotropia de superfície em filmes finos tem aplicação em gravação magnética, pois ela pode induzir uma magnetização perpendicular, permitindo o uso de mídias de gravação perpendicular que admitem maior densidade de bits por trilhas.

2.1.4 Anisotropia de forma

A anisotropia de forma é uma anisotropia essencialmente devida a geometria da amostra. Quando magnetizamos uma amostra em uma certa direção, dentro do próprio material, é induzido um campo antiparalelo à direção da magnetização, o qual é produzido pelos pólos na sua superfície. Como este campo se opõe à magnetização, seu efeito é de desmagnetizar a amostra [23].

Tomando como uma simples aproximação que o campo desmagnetizante, H_d , depende da geometria e da magnetização [21, 25], escrevemos: $H_d = -N_d M_s$. Aqui M_s é a magnetização de saturação e N_d é o fator desmagnetizante em uma dada direção.

Então, uma energia magnetostática associada à interação entre a magnetização e o campo desmagnetizante é armazenada no sistema, denominada energia desmagnetizante, E_D , a qual pode ser escrita no caso geral como:

$$E_D = \frac{1}{2} (N_x M_x^2 + N_y M_y^2 + N_z M_z^2). \quad (2.7)$$

Os cálculos dos fatores desmagnetizantes podem ser feitos analiticamente para alguns casos que serão analisados.

2.1.4.1 Esferóide prolato

Um modelo simples para descrever o fator desmagnetizante de uma amostra com dimensões a , b e c , com $c \gg a = b$ é tratá-la como um esferóide prolato conforme mostrado na Fig. 2.5.

Neste caso, os fatores desmagnetizantes na direção de a e na direção de c são dados respectivamente por [26]:

$$N_c = \frac{4\pi}{r^2 - 1} \left(\sqrt{\frac{1}{r^2 - 1}} \ln(r + \sqrt{r^2 - 1}) - 1 \right), \quad (2.8)$$

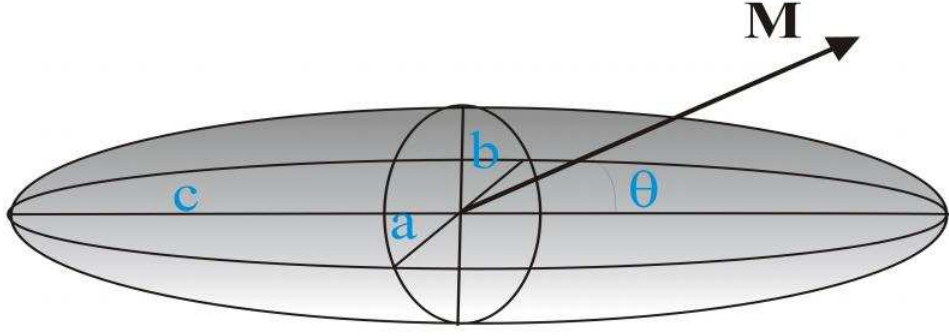


Figura 2.5: Um elipsóide de dimensões a , b e c .

$$N_a = N_b = \frac{4\pi - N_c}{2}, \quad (2.9)$$

aqui $r = c/a$.

2.1.4.2 Prisma retangular

O fator desmagnetizante para um prisma retangular (ver Fig. 2.6) de lados a , b e c foi calculado por A. Aharoni [27].

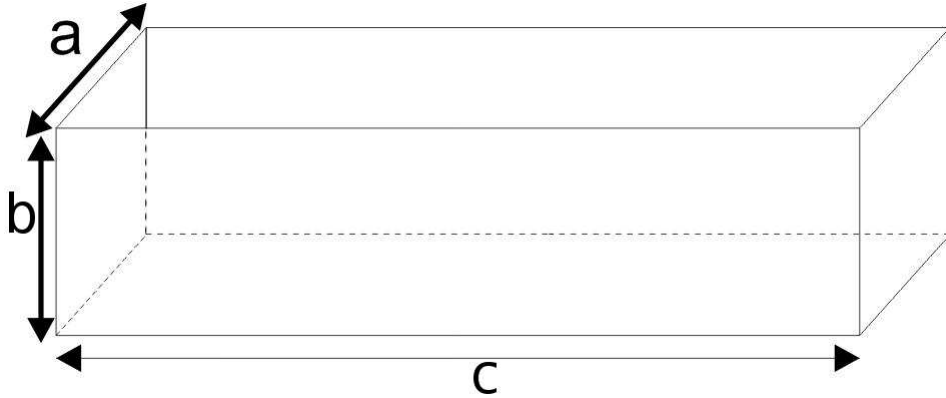


Figura 2.6: Prisma retangular de dimensões a , b e c .

No limite $c \rightarrow \infty$, os fatores desmagnetizantes são dados por:

$$N_b = 4 \left[\frac{(1 - p^2)}{2p} \ln(1 + p^2) + p \ln p + 2 \arctan(1/p) \right], \quad (2.10)$$

$$N_a = 4\pi - N_b. \quad (2.11)$$

Nas equações acima se $a > b$ então $p = \frac{a}{b}$.

Tanto a aproximação de esferóide prolato como prisma retangular são comumente usados no caso de filmes finos ferromagnéticos. No caso particular do MnAs com estrutura domínios com padrão de “stripes”, os fatores desmagnetizantes de um prisma retangular mostram-se mais adequados para o uso.

2.1.5 “Overskewing” de ciclos de histerese magnética

Uma maneira de avaliarmos a influência do campo desmagnetizante no ciclo de histerese magnética é representar por meio de um gráfico a resposta magnética M (ou a corrente magnética J) em função de $H - H_d$, onde H_d é a contribuição do campo desmagnetizante ao campo de anisotropia H_K . Se N_d for o fator desmagnetizante na direção ao longo da qual o ciclo de histerese está sendo medido, então, sua contribuição para o campo de anisotropia é $H_d = N_d M_s$. Assim, colocamos em um gráfico $M \times (H - H_d)$, e analisamos o ciclo de histerese resultante.

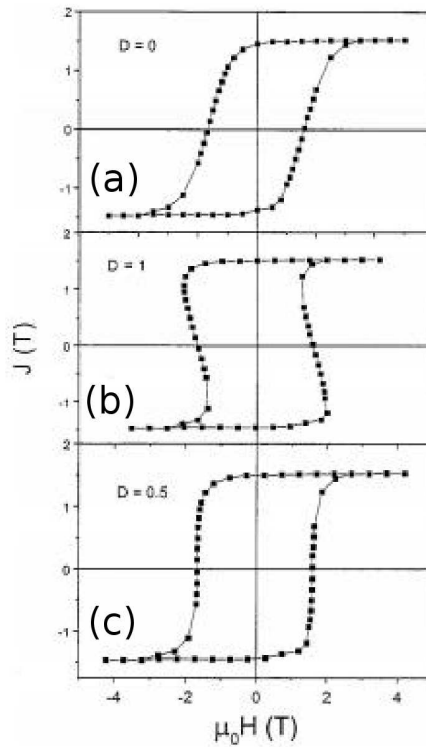


Figura 2.7: Exemplos de “Overskewing” (artefato de distorção ou arrastamento) dos ciclos de histerese [28, 29]. Figura adaptada de [28].

A Fig. 2.7 mostra os casos possíveis resultantes do arrastamento das curvas de histerese. Por exemplo a Fig. 2.7(a) mostra um ciclo de histerese como ele é medido, ou seja, sem descontarmos a atuação do campo desmagnetizante da amostra. Levando em conta a atuação do fator desmagnetizante no ciclo de histerese, a Fig. 2.7(b) mostra um sobrearrastamento do ciclo de histerese, fazendo com que o ciclo de histerese tenha uma susceptibilidade magnética negativa. Por sua vez, a Fig. 2.7(c) mostra o resultado de um arrastamento que deixa o ciclo de histerese retangular. Neste caso, o fator desmagnetizante, D , é capaz de explicar completamente a anisotropia do sistema [28, 29]. O sobrearrastamento (ou do inglês “Overskewing”) que ocorre na Fig. 2.7(b) não faz sentido, pois isto implica que a susceptibilidade de um material ferromagnético assumia valores negativos [29]. Então, há duas possibilidades para explicar o ocorrido:

- estamos superestimando a contribuição desmagnetizante;
- não está sendo levada em conta uma outra contribuição ao campo interno, forte e que se opõe ao campo desmagnetizante.

2.1.6 Magnetoelasticidade e magnetostricção

Um material ferromagnético quando submetido a um campo magnético externo pode ter suas dimensões alteradas devido a forças de origem magnetoelásticas e magnetostrictivas.

A energia magnetoelástica corresponde à parte da energia de um cristal que emerge da interação entre a magnetização e a deformação da rede cristalina. Quando o sistema não está deformado a energia magnetoelástica é definida como sendo nula [30, 31]. Juntamente com a energia magnetoelástica, em um filme fino, temos uma energia elástica, a qual é puramente devida a efeitos de deformação da rede cristalina. O equilíbrio entre as energias magnetoelásticas e elásticas é o responsável por várias configurações de domínio intrínsecas em sistemas magnéticos.

Magnetostricção ocorre devido a dependência da energia de anisotropia com a deformação da rede cristalina de tal modo que o equilíbrio estável do cristal está numa configuração deformada.

2.1.6.1 Sistema hexagonal

De acordo com Brantley [32] para um sistema com simetria hexagonal a energia elástica, F_{el} , é dada por:

$$F_{el} = \frac{1}{2}c_{11}(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2) + c_{12}\epsilon_1\epsilon_2 + c_{12}\epsilon_3(\epsilon_1 + \epsilon_2) + \frac{1}{2}c_{33}\epsilon_3^2 + \frac{1}{2}c_{44}(\epsilon_4^2 + \epsilon_5^2) + \frac{1}{4}(c_{11} - c_{12})\epsilon_6^2, \quad (2.12)$$

e a energia magnetoelástica, F_{ME} , é [33]:

$$F_{ME} = B_1 [(\alpha_1^2 - 1)\epsilon_1 + \alpha_2^2\epsilon_2 + \alpha_1\alpha_2\epsilon_6] - B_2\alpha_3^2\epsilon_3 - B_3\alpha_3^2(\epsilon_1 + \epsilon_2) + B_4(\alpha_2\alpha_3\epsilon_4 + \alpha_1\alpha_3\epsilon_5). \quad (2.13)$$

Aqui α_1 , α_2 e α_3 são os cossenos diretores com respeito a eixo c (ou o eixo [0001], ver Fig. 2.1) da rede hexagonal, ϵ_i representa a deformação da rede na notação de voigt, c_{ij} e B_i denotam as constantes elásticas e os acoplamentos magnetoelásticos, respectivamente.

2.1.6.2 Sistema cúbico

De acordo com Kittel [30] para um sistema com simetria cúbica a energia elástica é dada por:

$$F_{el}^c = \frac{1}{2}c_{11} (\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 + \epsilon_3^2) + \frac{1}{2}c_{44} (\epsilon_4^2 + \epsilon_5^2 + \epsilon_6^2) + c_{12} (\epsilon_1\epsilon_2 + \epsilon_2\epsilon_3 + \epsilon_1\epsilon_3), \quad (2.14)$$

e a energia magnetoelástica é [30]:

$$F_{ME}^c = B_1 (\alpha_1^2\epsilon_1 + \alpha_2^2\epsilon_2 + \alpha_3^2\epsilon_3) + B_2 (\alpha_1\alpha_2\epsilon_6 + \alpha_2\alpha_3\epsilon_4 + \alpha_3\alpha_1\epsilon_5). \quad (2.15)$$

Aqui α_1 , α_2 e α_3 são os cossenos diretores com respeito a eixo c da rede cúbica, ϵ_i representa a deformação na notação de voigt, c_{ij} e B_i denotam as constantes elásticas e os acoplamentos magnetoelásticos, respectivamente.

2.1.6.3 Regime não-linear dos acoplamentos magnetoelásticos

O valor dos acoplamentos magnetoelásticos para filmes finos pode diferir do valor encontrado para filmes massivos, sendo que até mesmo o sinal pode mudar. Tal discrepância pode ser devida a efeitos de superfície ou efeitos de tensão de segunda ordem.

Recentemente, uma teoria não-linear foi proposta para explicar tal complexa dependência com a deformação de segunda ordem. Se efeitos de superfície são importantes então escrevemos: $B_{tf} = B_{bulk} + \frac{B_s}{t}$. Na igualdade anterior B_{tf} e B_{bulk} são os acoplamentos magnetoelásticos para filme fino e massivo, respectivamente, t é a espessura do filme e B_s é a contribuição de superfície para o acoplamento magnetoelástico. Agora, se o efeito de tensão é importante para avaliar efeitos não lineares, escrevemos: $B_{tf} = B_{bulk} + D_i\epsilon_i$; na igualdade anterior, B_{tf} e B_{bulk} são os acoplamentos magnetoelásticos para filme fino e massivo, respectivamente, ϵ_i é a deformação na notação de Voigt e D_i é a correção de primeira ordem para o acoplamento magnetoelástico de filme fino.

2.1.7 Efeitos de segunda-ordem

Em geral, para termos um bom modelo para a histerese magnética, temos que usar termos de segunda ordem na energia livre magnética. Como mencionado anteriormente, um termo de ordem superior pode ser oriundo da energia magnetocristalina, denominado K_2 .

Contribuições de segunda ordem podem ter origem de diferentes fontes, como por exemplo da energia magnética e magnetostrictiva, as quais estão associadas à tensão.

Abordaremos as correções que provêm de efeitos de segunda ordem na energia magneto-elástica e magnetostrictiva.

2.1.7.1 Distorção hexagonal e ortorrômbica

Uma abordagem para derivar uma fórmula da contribuição de segunda ordem foi efetuada por Mason [22]. Conforme discutido em tal trabalho, tal contribuição provêm da mudança da posição de equilíbrio das posições atômicas quando campo magnético externo é aplicado. Então, tal deformação da rede contribui de forma a alterar a energia livre total do sistema.

No mesmo trabalho, Mason derivou a contribuição da tensão induzida por campo para a anisotropia magnética para sistemas com diversas estruturas cristalinas. Em geral, tais contribuições tem uma dependência da forma α_i^2 e α_i^4 onde α_i são os cossenos diretores e $i = 1, 2, 3$. Como tratamos tais correções como termos de segunda ordem na energia livre magnética, desprezamos as contribuições em primeira ordem pois elas são proporcionais a ϵ_i^2 , onde ϵ_i é a deformação na notação de Voigt.

Admitimos que as contribuições de segunda ordem são da forma $K_2^h \sin^4 \theta$ e $K_2^o \sin^2 \theta \cos^2 \phi$ para uma rede com estrutura hexagonal e ortorrômbica, respectivamente.

2.1.8 Tensão induzida por campo magnético

A influência do campo magnético externo na tensão pode ser determinada por experimentos de magnetometria. O fenômeno físico que relaciona aplicação de campo magnético externo e tensão induzida em uma amostra ferromagnética é denominado de “Tencionamento induzido por campo” (ou do inglês “field-induced stress”). Tal fenômeno é decorrente das interações magnetoelásticas e elásticas em um filme ferromagnético e sua manifestação se dá a partir de uma apreciável deformação magnetomecânica no sistema. Ainda, se os acoplamentos magnetoelásticos da amostra são relevantes, notamos que a tensão medida ao longo de uma dada direção pode ser aumentada de ordens de grandeza aplicando campo magnético, conforme mostrado na Fig. 2.8.

Fisicamente o que acontece é que ao submetermos um filme fino a um campo magnético externo, induzimos uma deformação magnetomecânica e, como o filme está fixo ao substrato, uma tensão induzida por campo é observada [33, 35].

Um método de determinar experimentalmente a tensão induzida por campo são os experimentos de magnetometria de haste vibrante (em inglês CBM, que significa Cantilever Beam Magnetometry) [33, 35]. Assim, por meio da energia magnetoelástica e magnetostrictiva, seguindo a discussão em [35] podemos determinar para uma rede hexagonal as seguintes relações entre a tensão induzida, acoplamentos magnetoelásticos e constantes magnetoelásticas [33, 35]:

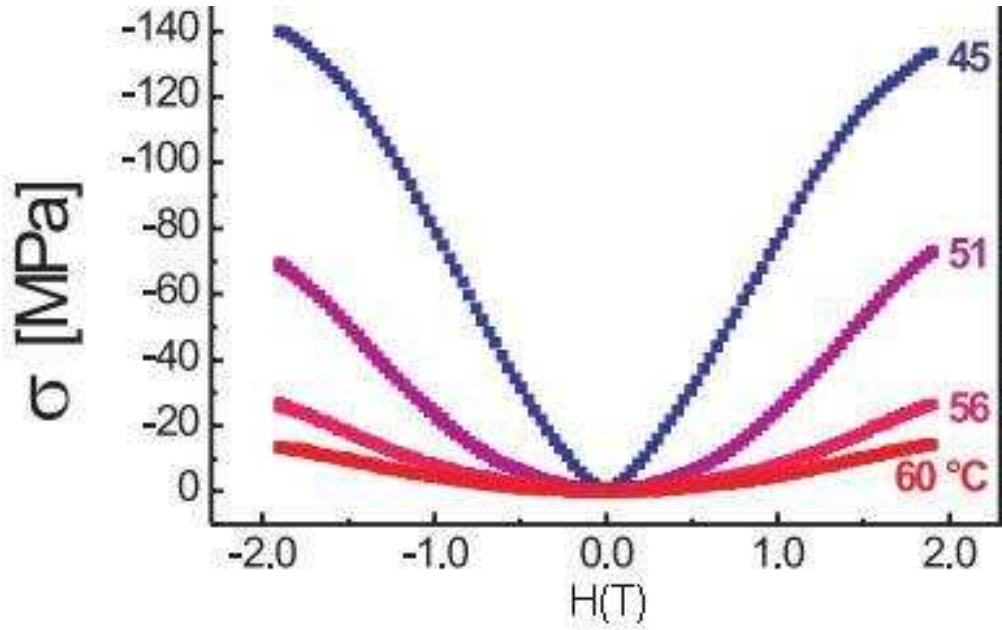


Figura 2.8: Nesta figura é demonstrado o fenômeno físico de “field-induced stress”, no qual a tensão medida ao longo de uma dada direção pode ser aumentada de ordens de grandeza aplicando campo magnético. Extraído da Ref. [34].

$$\sigma_1^b - \sigma_1^a = -B_1(1 + c_{12}/c_{11}), \quad (2.16)$$

$$\sigma_1^c - \sigma_1^a = -B_1 - B_3(1 - c_{12}/c_{11}). \quad (2.17)$$

Nas equações acima, a diferença $\sigma_1^b - \sigma_1^a$ corresponde a diferença em tensão magnetostritiva medida ao longo do eixo fácil para saturar a magnetização da amostra ao longo da direção b (isto é, fora do plano, denotado por $[001]$) e ao longo do eixo a (isto é, no plano, denotado por $[110]$). Saturando a magnetização ao longo do eixo c temos $\sigma_1^c - \sigma_1^a$.

2.1.9 Contribuição da deformação da rede cristalina induzida por campo magnético para a anisotropia magnética

Kittel em seu famoso artigo publicado em 1949 [30] sugeriu que a deformação da rede cristalina induzida por aplicação de campo magnético aparentemente contribui para a anisotropia magnética de um dado sistema magnético. Se as determinações experimentais da energia de anisotropia pudessem ser efetuadas mantendo-se as dimensões da rede cristalina constantes, então a existência da magnetostricção não teria efeito direto no resultado da medida da anisotropia. Contudo, na prática mede-se a anisotropia a constante tensão, logo a rede pode se deformar devido a ação de forças magnetoelásticas.

O procedimento descrito por Kittel é simples. Ele sugere que as deformações da rede cristalina, ϵ_i , são tais que, para um filme massivo, elas minimizam a energia livre magnética total do sistema ($\frac{\partial F}{\partial \epsilon_i} = 0$). Também é sugerido que tal deformação contribui para a anisotropia total e expressões analíticas são obtidas e discutidas em tal trabalho.

Nesta dissertação analisamos a contribuição da deformação da rede cristalina induzida por campo magnético para a anisotropia para sistemas hexagonais e cúbicos, sujeitos a estado de deformação geral e biaxial e aplicaremos tais resultados para alguns reais. Tais análises são feitas no Apêndice A.

2.1.10 Modelo de Stoner-Wohlfarth

O Modelo de Stoner-Wohlfarth (SW) é o modelo mais simples que é suficientemente adequado para descrever a física do magnetismo de grãos ferromagnéticos que são pequenos ao bastante para ser bem descrito por um modelo de domínios magnéticos simples [20, 36]. Tal modelo não inclui a dinâmica de paredes de domínio magnéticas, mesmo assim tem sido apropriado, mediante a implementações, para a modelagem de um sistema ferromagnético.

Para ilustrar o modelo de Stoner-Wohlfarth consideramos a magnetização M de uma amostra submetida a duas forças que competem para alinhá-la em presença de um campo magnético externo: uma é devida a uma anisotropia uniaxial denotada por K que favorece uma certa direção e a outra é devida a um campo magnético externo H . A magnetização da amostra é considerada igual a magnetização de saturação denotada por M_s . A magnetização medida na direção do campo magnético aplicado evolui em um espaço bidimensional (veja Fig. 2.9), sendo caracterizada por um ângulo θ que M_s faz com o eixo de anisotropia. Aqui ϕ é o ângulo que o campo magnético externo faz com o eixo de anisotropia (veja Fig. 2.9). Então, a densidade de energia livre total é dada por:

$$E = K \sin^2 \theta - H M_s \cos(\theta - \phi). \quad (2.18)$$

Na equação acima K é a constante magnetocristalina de primeira ordem. É interessante analisar a equação acima a campo nulo ($H = 0$). A magnetização prefere se alinhar na direção que a energia livre total magnética é mínima. A energia é mínima em $\theta = 0$ quando $K > 0$ e mínima em $\theta = \frac{\pi}{2}$ quando $K < 0$, então a direção de magnetização espontânea depende fortemente do valor efetivo da constante de anisotropia magnetocristalina do sistema.

Ao levarmos mais contribuições para a energia do sistema, como por exemplo a energia desmagnetizante, denotamos N_\perp e N_\parallel como os fatores desmagnetizantes perpendicular e paralelo ao eixo- z , respectivamente.

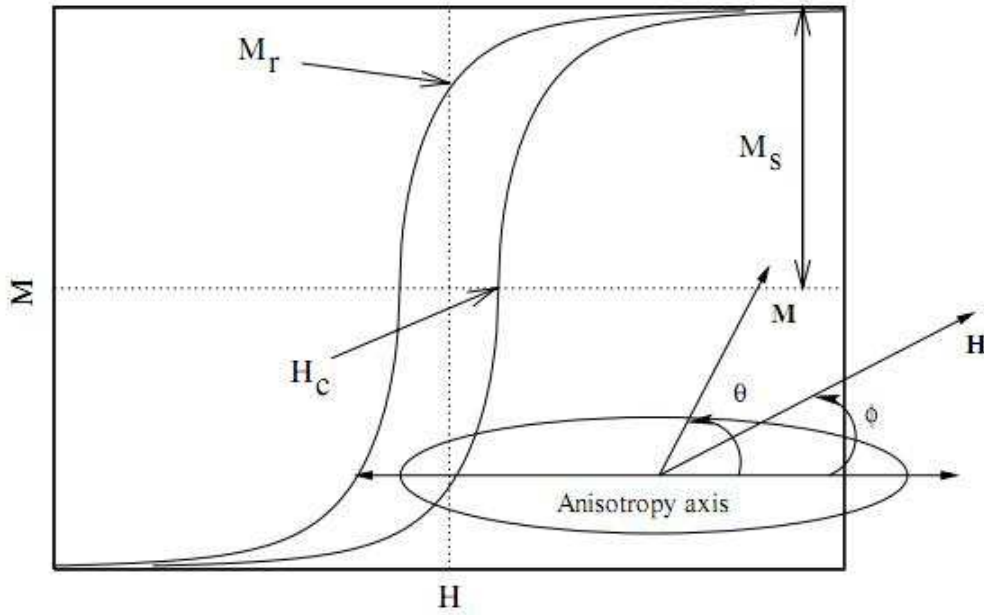


Figura 2.9: Ciclo de histerese característico de uma partícula esférica ferromagnética. Aqui θ e ϕ correspondem aos ângulos que a magnetização e o campo externo fazem com o eixo de anisotropia. M_s é a magnetização de saturação, M_r é a magnetização remanente e H_c é o campo coercivo da partícula esférica.

Assim, a energia total é reescrita como:

$$E = K_{eff} \sin^2(\theta) - M_s H \cos(\theta - \phi), \quad (2.19)$$

aqui denotamos K_{eff} como sendo a constante de anisotropia efetiva e

$$K_{eff} = [K + M_s^2(N_{\perp} - N_{\parallel})/2]. \quad (2.20)$$

No equilíbrio a magnetização aponta ao longo de uma direção definida pelo ângulo θ^* que minimiza a energia total.

A condição de mínimo é que:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial \theta} \right)_{\theta=\theta^*} = 0, \quad (2.21)$$

e:

$$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial \theta^2} \right)_{\theta=\theta^*} > 0. \quad (2.22)$$

Satisfeitas as condições de mínimo encontramos a magnetização paralela ao campo magnético a partir da relação $M_{//} = M_s \cos(\theta - \phi)$. A Fig. 2.10 mostra a histerese magnética para diversos valores de ϕ ; aqui h é o campo reduzido que é dado por $h = H/H_K$

e H_K é o campo de anisotropia dado por: $H_K = 2K_{eff}/M_s$.

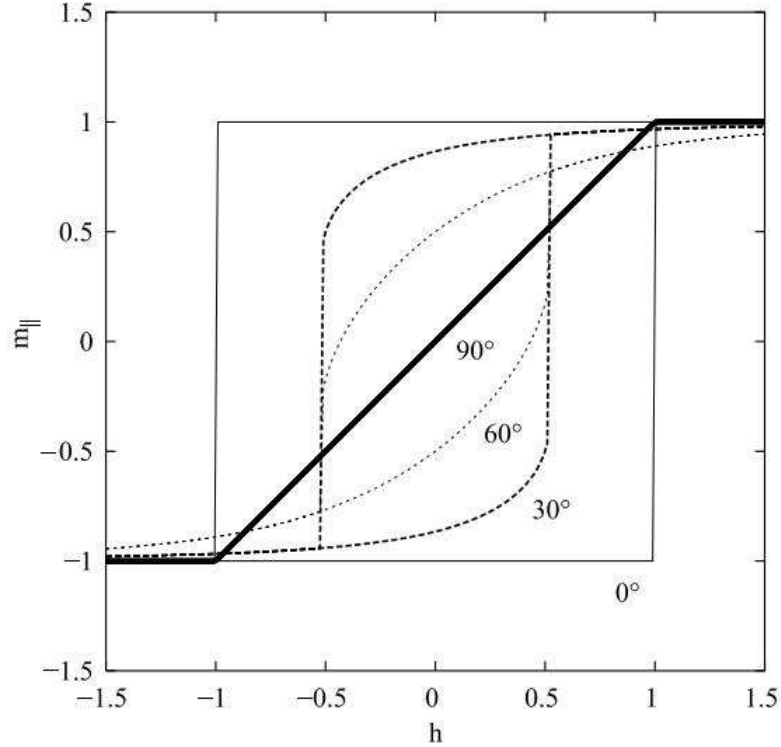


Figura 2.10: Ciclos de histerese conforme o modelo de Stoner-Wohlfarth para diversos valores do ângulo que o campo magnético faz com o eixo de anisotropia. O ciclo de histerese para o ângulo de 0° tem reversão de magnetização abrupta em $H/H_K = 1$, assemelhando-se a uma curva de histerese magnética para um eixo de fácil magnetização. A curva para o ângulo de 90° mostra a magnetização sendo coerentemente rotacionada, digamos, da direção “+z” para a direção “-z”, apresentando magnetização remanete e campo coercivo nulos. Para ângulos entre 0° e 90° a histerese se dá como uma mistura de reversão coerente e saltos abruptos da magnetização.

A Fig. 2.11 mostra como ocorre a reversão da magnetização mediante a aplicação de campo magnético externo para $\phi = 0^\circ$. Observe que para $H = 0$ a direção preferencial da magnetização é $\theta = 0$. Para $H < H_c$, onde H_c é o campo coercivo a direção preferencial da magnetização ainda é $\theta = 0$, mas tal mínimo não é tão estável quanto antes. Quando o campo magnético aplicado é igual ao campo coercivo do sistema, ou seja, $H = H_c$, $\theta = 0$ não é mais um ponto de equilíbrio, mas tende a perder estabilidade e fazer com que a nova configuração de equilíbrio seja $\theta = \pi$. Para $H > H_c$ a configuração preferencial da magnetização é $\theta = \pi$. Dizemos que para que a magnetização seja revertida da direção $\theta = 0$ para $\theta = \pi$, uma barreira de potencial tem que ser vencida.

Um esquema elegante para avaliarmos a histerese pelo modelo de SW é o astróide de Stoner-Wohlfarth [20, 36, 37]. No nosso caso, no modelo simples de Stoner-Wohlfarth abordado aqui, colocando a primeira e a segunda derivadas da energia livre iguais a zero, chegamos à equação do astróide de Stoner-Wohlfarth:

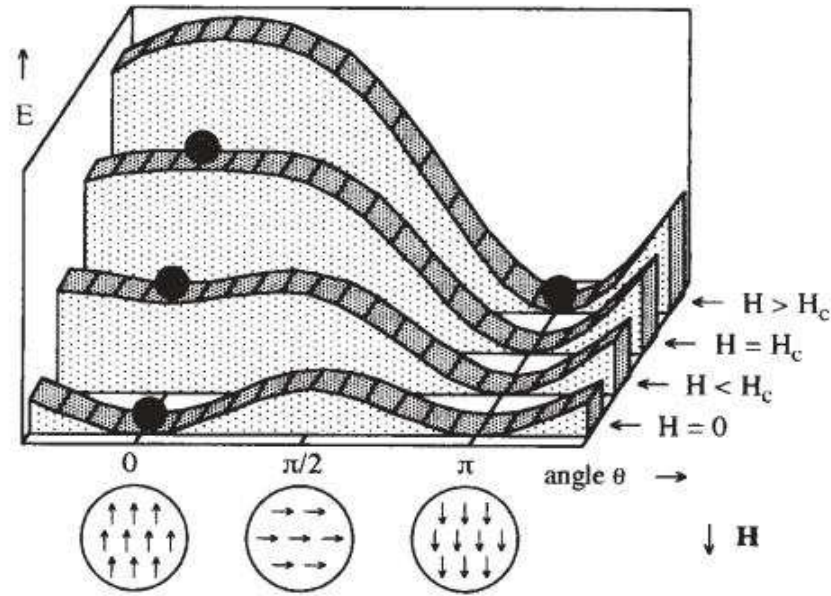


Figura 2.11: Nesta figura é mostrado um esquema elegante para mostrar como a energia livre magnética total de um sistema magnético varia mediante a variação do campo magnético aplicado e da configuração de mínimo da magnetização. Note que a magnetização está em um mínimo correspondente a $\theta = 0$ para $H \leq H_c$, tendo um salto abrupto para $\theta = \pi$ em $H > H_c$. Dizemos que foi necessário que a magnetização vença uma barreira de energia para que seja possível a sua reversão da direção $\theta = 0$ para $\theta = \pi$.

$$\left(\frac{H_{\perp}}{H_K}\right)^{2/3} + \left(\frac{H_{\parallel}}{H_K}\right)^{2/3} = 1. \quad (2.23)$$

Aqui H_{\perp} e H_{\parallel} são as componentes do campo magnético externo H ao longo dos eixos difícil e fácil, respectivamente. A equação 2.23 representa um astróide no plano $H_{\perp} \times H_{\parallel}$ conforme mostrado no painel (a) da Fig. 2.12. Quando o campo magnético \vec{H} está no interior do astróide existem duas possíveis soluções de equilíbrio, enquanto que fora do astróide nenhuma solução é possível. No painel (b) da Fig. 2.12 é mostrado um diagrama de máximos e mínimos da energia livre para a amostra quando o campo magnético é aplicado na direção de fácil e de difícil magnetização. Em baixo desse mesmo painel, temos os ciclos de histerese magnética previstos nos respectivos casos.

O modelo de Stoner-Wohlfarth é um modelo simples que nos permite extrair muita informação física do sistema. No entanto, tal modelo tem suas limitações, ele funciona bem quando a dinâmica do sistema pode ser bem descrita por um conjunto independente de monodomínios. Além disto, tal modelo apresenta uma peculiaridade, ele pode descrever ciclos de histerese de sistemas reais sem inter cruzamento dos ramos até um ângulo crítico de $76,72^\circ$. Para ângulos entre 75° e 90° , ocorre o inter cruzamento ou “crossover” dos ciclos de histerese, como mostrado na Fig. 2.13. O inter cruzamento dos ciclos de histerese ocorre

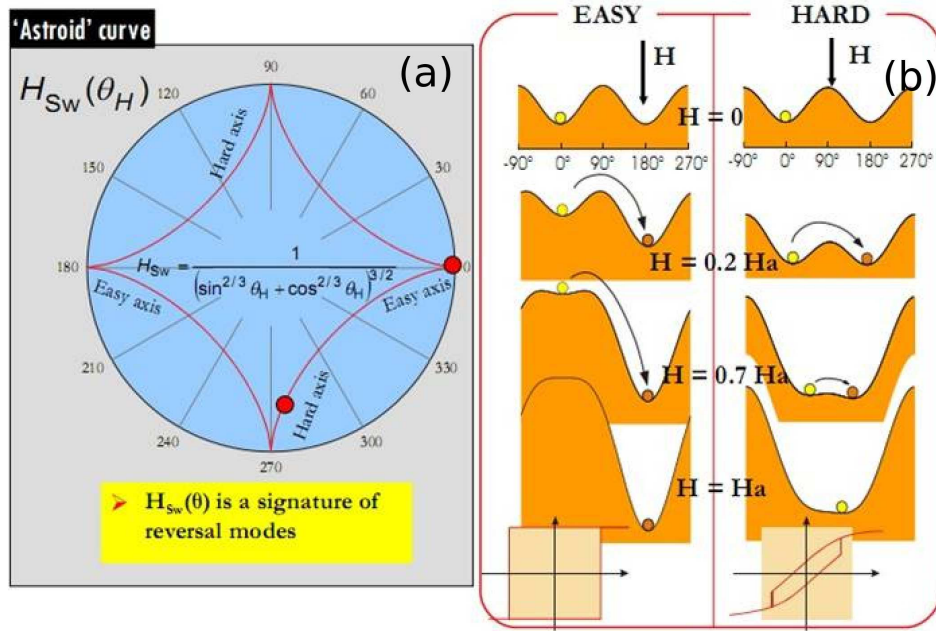


Figura 2.12: Astróide do modelo de Stoner-Wohlfarth (esquerda) e representação da partícula em mínimos de energia livres ao longo dos eixos fácil e uma direção de magnetização intermediária (direita). Ciclos de histerese conforme o modelo de Stoner-Wohlfarth assumem formas bem diferentes para diversos valores do ângulo que o campo magnético faz com o eixo de anisotropia. Adaptado da internet de sítio desativado.

em sistemas reais, para mais detalhes o leitor deverá consultar a referência [38].

Nesse trabalho utilizaremos uma modelagem que estende o uso do modelo de Stoner-Wohlfarth.

Além da anisotropia magnetocristalina e de forma, introduzimos outros termos de anisotropia magnética.

Generalizações desse tipo são comuns em parte devido ao modelo ser bastante simples e permitir descrever muitas propriedades magnéticas de um ferromagneto.

Outro ponto importante é que esse tipo de modelo faz uso de termos de energia magnética diretamente medidos nos experimentos. Isso permite obter expressões analíticas para parâmetros fenomenológicos ou ainda introduzi-los diretamente na expressão da energia livre magnética.

Nesse trabalho faremos uso de ambas as facilidades. Obteremos expressões analíticas das constantes anisotropias e campos de saturação e faremos uso de parâmetros fenomenológicos. Além disto, usaremos um modelo de Stoner-Wohlfarth modificado (ou implementado), aderindo fontes de anisotropia que foram experimentalmente constatadas como sendo relevantes ao sistema por diferentes grupos de pesquisa.

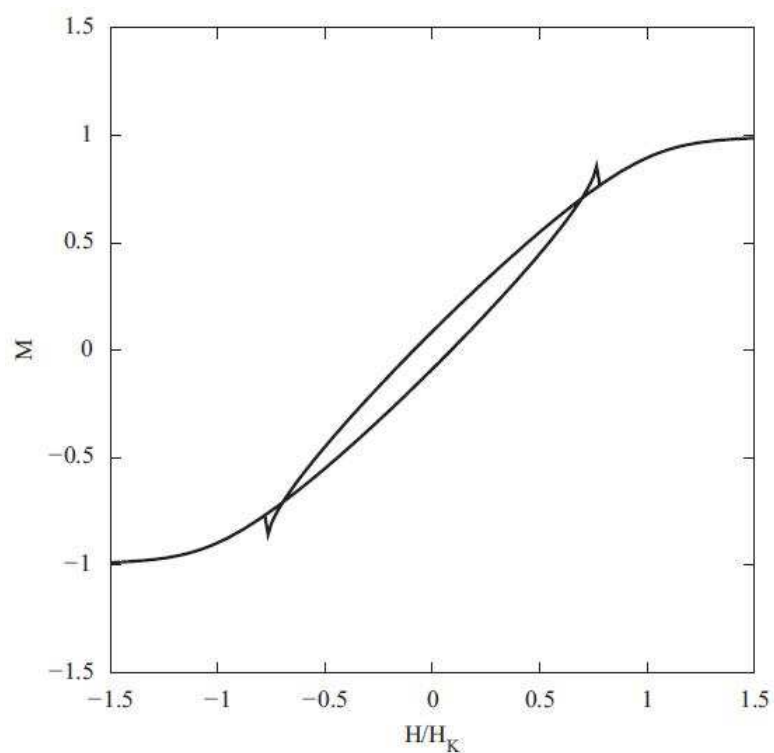


Figura 2.13: Exemplo de “crossover” do ciclo de histerese para o modelo de Stoner-Wohlfarth. Tal ocorrência ocorre quando aplicamos campos magnéticos fazendo um ângulo com o eixo de anisotropia maior que $76,72^\circ$ e menor do que 90° . Conforme mostrado nesta figura, os ciclos são interpenetrantes próximo à saturação da magnetização

MnAs e epicamadas de MnAs/GaAs

Neste capítulo é apresentada uma breve introdução sobre as propriedades estruturais e magnéticas do MnAs massivo e de epicamadas de MnAs.

3.1 Propriedades de filmes massivos de MnAs

MnAs ou Arseneto de Manganês é um material ferromagnético que tem atraído a atenção da comunidade científica por mais de um século.

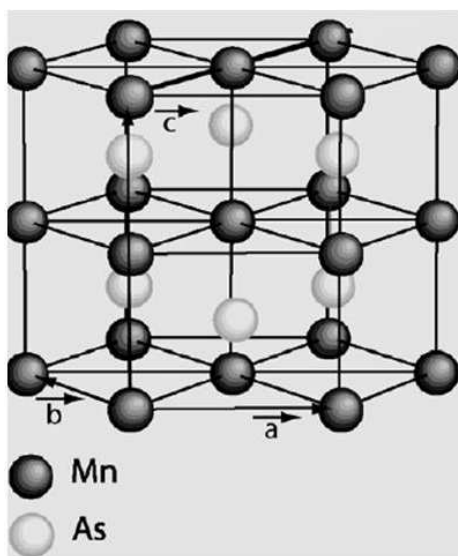


Figura 3.1: Fase ferromagnética de filmes massivos de MnAs que consiste de células hexagonais, as quais consistem de planos de Mn com As alternados.

O estudo do MnAs foi iniciado por Heusler [39]. Em seguida, Hilpert e Dieckmann [40] descobriram que ele é ferromagnético com uma temperatura de Curie $T_C \approx 313$ K. Nesta transição ferromagnética, uma transição metal-isolante também ocorre [41, 42]. Alguns anos depois, uma grande descontinuidade do parâmetro de rede com uma contração

em volume de aproximadamente 2% na temperatura de Curie foi observada por Willis e Rooksby [43]. Na fase puramente ferromagnética, que corresponde ao α -MnAs, como mostrado na Fig. 3.1, os vetores da rede cristalina são denotados por \vec{a} , \vec{b} e \vec{c} , e os parâmetros de rede são iguais a: $a = 3.72 \text{ \AA}$ e $c = 5.71 \text{ \AA}$. A fase β do MnAs consiste de uma rede hexagonal distorcida, logo assemelha-se a uma rede ortorrômbica. Conforme mostrado na Fig. 3.2, fazendo uma correspondência da rede hexagonal distorcida com uma estrutura ortorrômbica, temos $\vec{a}_{ortho} = \vec{c}$ e $\vec{b}_{ortho} = \vec{a}$ e os valores dos parâmetros de rede são: $a = 5.72 \text{ \AA}$, $b = 3.67 \text{ \AA}$ e $c = 6.37 \text{ \AA}$.

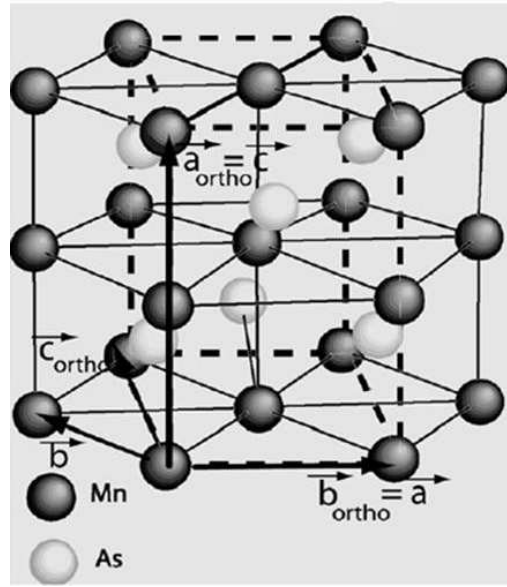


Figura 3.2: Esquema para mostrar a fase β do MnAs, a qual pode ser vista como uma rede hexagonal distorcida e, portanto, pode ser considerada como uma rede ortorrômbica.

Bean e Rodbell usaram a mudança de volume para descrever a diminuição de magnetização como uma transição de primeira ordem, a qual acontece com um calor específico de 1.79 cal/K [44]. Observações de calor específico e uma histerese térmica de 10 K também confirmaram a natureza da transição como sendo de primeira ordem [45].

Estudos de difração de raio-X mostraram uma mudança no ordenamento cristalográfico na temperatura que ocorre a transição de primeira ordem, uma transição que se inicia de uma fase hexagonal (α -MnAs, ver Fig. 3.1) com alta simetria do tipo NiAs ($B8_1$) para uma fase paramagnética ortorrômbica (β -MnAs) com baixa simetria, que é do tipo MnP ($B31$) [47]. A distorção ortorrômbica decresce com o aumento da temperatura e a estrutura hexagonal reaparece acima de $T_N = 399 \text{ K}$, na qual uma transição de segunda ordem acontece, sem mudança no volume, a qual foi detectada por experimentos de calorimetria [46]. Entre T_C e T_N a susceptibilidade magnética aumenta com a temperatura [41] e acima de T_N segue uma lei de Curie para a susceptibilidade, como mostrado na Fig. 3.3.

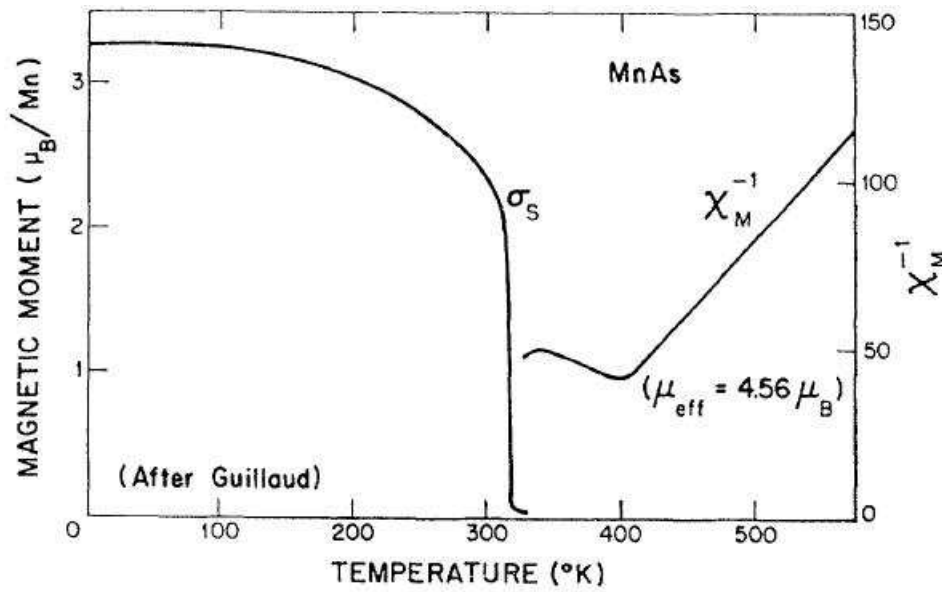


Figura 3.3: À esquerda é mostrado o diagrama $M \times T$ para a transição de fase do MnAs. É mostrado o comportamento que a magnetização segue com a temperatura. Note que há uma discontinuidade da magnetização em torno de $T = 313\text{K}$, o que caracteriza a transição de fase como sendo de primeira ordem. À direita é mostrado o comportamento do inverso da susceptibilidade magnética (χ_M^{-1}) contra a temperatura T para o MnAs. A susceptibilidade magnética para temperaturas entre 313K e 400K tem um comportamento anômalo, tal comportamento já foi atribuído a uma ordem antiferromagnética do sistema, que, no entanto, não foi verificada experimentalmente. Adaptado da referência [46].

3.1.1 Filmes Finos de MnAs/GaAs

Para filmes finos de MnAs crescidos sobre substrato de GaAs as propriedades magnéticas e estruturais mudam. Devido ao substrato que impede que o MnAs se expanda livremente, o substrato impõe ao filme uma restrição nas dimensões laterais, ou seja, o filme não está livre para se deformar, mas está aderido ao substrato. Isto faz com que à medida que a temperatura aumente, e como o filme de MnAs tem diferente coeficiente de dilatação térmica que o substrato de GaAs, uma energia elástica seja armazenada no filme. Experimentalmente, ao contrário dos filmes massivos, sabemos que em filmes finos a transição de fase não ocorre abruptamente, mas é observada uma coexistência de fases α e β [48]. A fase β aparece em torno de 284 K e as fases coexistem ao menos por 30 K. A fase β do MnAs é considerada como uma fase α levemente distorcida, podendo ser considerada como uma célula ortorrômbica distorcida. Estudos experimentais e teóricos sugerem que a fase β do MnAs é antiferromagnética [31, 42, 49].

A Fig. 3.4 (a) mostra a estrutura cristalina hexagonal do tipo NiAs para a fase ferromagnética (fase α do MnAs). A estrutura cristalina do MnAs consiste de planos de Mn e As. A Fig. 3.4 (b) mostra a estrutura cristalina do MnAs com um estrutura célula unitária ortorrômbicamente distorcida.

Portanto, a transição de fase do MnAs é do tipo magnetoestrutural.

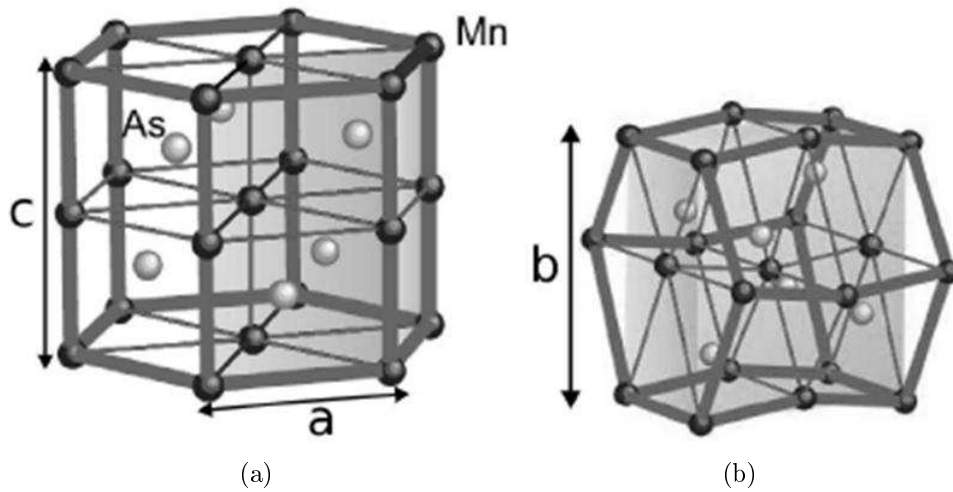


Figura 3.4: (a) Estrutura cristalina tipo NiAs para a fase ferromagnética do MnAs consistindo de planos hexagonais de Mn e As. (b) Estrutura cristalina do MnAs com uma célula unitária ortorombicamente distorcida.

3.1.1.1 Epicamadas de MnAs/GaAs(001)

A relação de epitaxia de filmes finos de MnAs crescidos sobre o substrato de GaAs(001) é mostrada na Fig. 3.5. Note que como mostrado nesta figura, a relação de epitaxia do MnAs sobre o substrato de GaAs(001) corresponde ao hexágono de MnAs deitado sobre o plano de GaAs com o seu eixo c paralelo à direção $[1\bar{1}0]$.

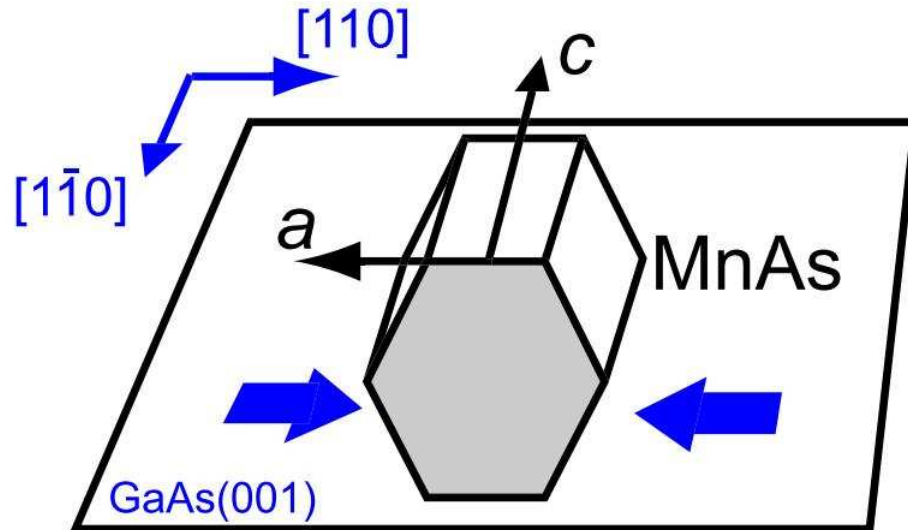


Figura 3.5: Relação de epitaxia do MnAs sobre o substrato de GaAs no caso MnAs/GaAs(001). As setas grandes azuis indicam a existência de um campo de tensão compressiva no plano dos filmes.

Para epicamadas de MnAs/GaAs(001) a coexistência da fase ferromagnética α -MnAs (hexagonal) e paramagnética β -MnAs (ortorrômbica) é auto-organizada em um padrão composto de domínios na forma de “stripes” (no sentido de faixas, como mostrado

na Fig. 3.6) dispostas ao longo da direção $[0001]$. A formação do “stripes” é ainda controversa. É observado que a posição e o período dos “stripes” depende das condições de crescimento usadas na fabricação dos filmes de MnAs. O padrão dos stripes depende do campo de tensão mecânica residual dos filmes. Análises de microscopia de varredura por tunelamento indicam que a posição e o período mantém-se praticamente inalterada para um filme submetido a ciclos térmicos ao redor da temperatura de transição magnetoestrutural.

Para o MnAs/GaAs(001) há uma deformação compressiva ao longo da direção MnAs $[11\bar{2}0]$ e uma deformação expansiva ao longo da direção MnAs $[0001]$ a temperatura ambiente.

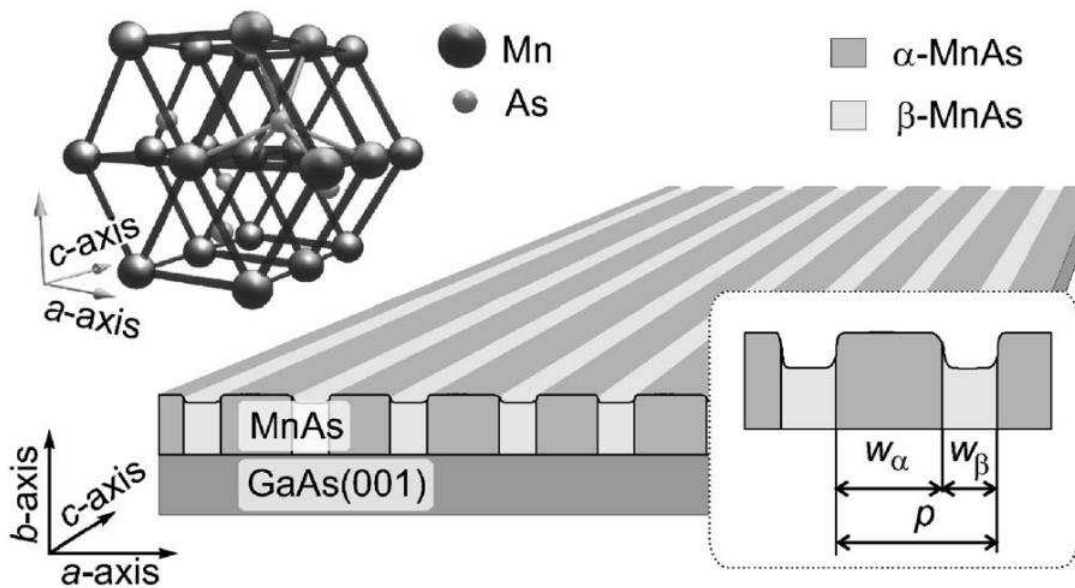


Figura 3.6: Estrutura de domínios tipo-stripe para o MnAs/GaAs(001). É mostrada a orientação dos “stripes” em relação a estrutura cristalina do MnAs. Temos listras cinzas denotando a fase ferromagnética e listras cinza claro denotando a fase paramagnética do MnAs. Aqui w_α é a largura das “stripes” ferromagnéticas e w_β é a largura das “stripes” da fase paramagnética. O curioso é que p , o período entre as fases ferro e paramagnéticas, não depende da temperatura, mas somente da espessura do filme.

É importante salientar que sob algumas condições de crescimento não totalmente otimizadas pode ocorrer o crescimento de epicamadas MnAs/GaAs(001) com a presença de domínios epitaxiais.

A Fig. 3.7 exhibe os dois tipos de domínios mais comumente observados com as suas respectivas relações epitaxiais entre MnAs e GaAs. Em nosso trabalho descrevemos o comportamento de epicamadas MnAs/GaAs(001) onde predominam domínios epitaxiais com a orientação A ; domínios B estão presentes na amostra, mas em pequena quantidade.

A Fig. 3.8 mostra a dependência com a temperatura da magnetização sob resfriamento a campos magnéticos de 5 kOe para o MnAs/GaAs(001). A parte esquerda de tal figura mostra ciclos de histerese magnética medidas em temperaturas em torno da

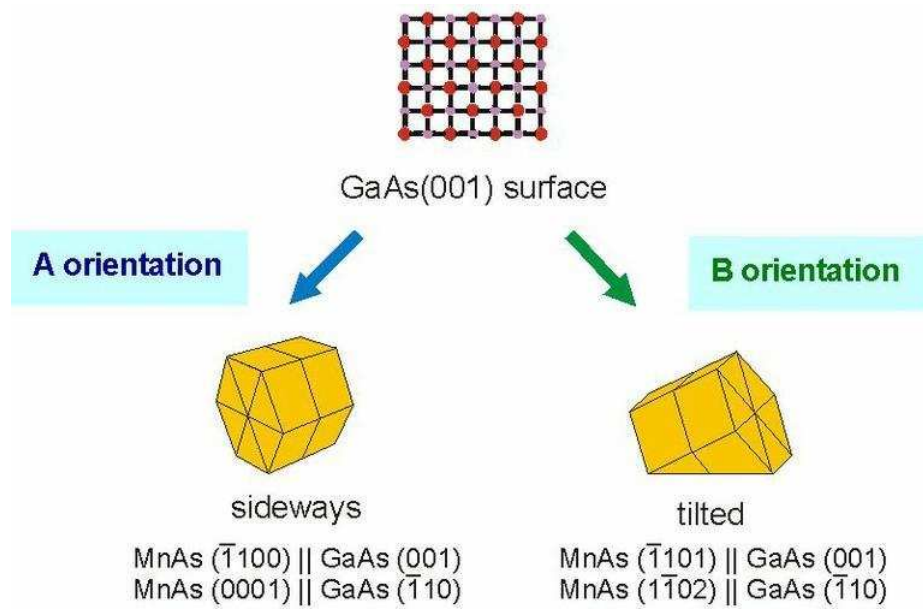


Figura 3.7: Domínios epitaxiais observados em epicamadas MnAs/GaAs(001), conforme Ref. [http://www.pdi-berlin.de/research/core-research/ferromagnet-semiconductor-hybrid-structures/spin-injection/mnas-gaas]. Temos domínios *A* que foram bem crescidos e apresentam uma boa cristalinidade, enquanto que domínios *B* correspondem ao caso de partes mal crescidas no filme.

transição de fase magnetoestrutural com o campo magnético aplicado ao longo do eixo magneticamente fácil do filme. Notamos que a magnetização decresce continuamente com a temperatura, mostrando que a transição, diferente da de filmes massivos de MnAs, é de segunda ordem. O inset de tal figura mostra como as curvas de magnetização para o eixo de fácil magnetização variam em função da temperatura. Podemos notar que elas identificam claramente uma transição de um estado ferromagnético para um estado paramagnético.

A Fig. 3.9 mostra ciclos de histerese medidos a temperatura ambiente com campos magnéticos aplicados ao longo de diferentes direções cristalográficas para o MnAs/GaAs(001). A parte interior da figura mostra as direções ao longo das quais os campos magnéticos foram aplicados com relação a célula hexagonal da estrutura do cristal. As curvas correspondentes ao eixo de fácil, intermediário e de difícil magnetização são $H//a$, $H//b$ e $H//c$, respectivamente. Note que uma componente mal crescida *B* está presente nas amostras.

Uma outra importante propriedade de epicamadas de MnAs/GaAs(001) é a presença de uma componente de magnetização fora do plano, ou seja, ferromagnetismo fora do plano do MnAs (ver Fig. 3.10). Esta é uma propriedade que aumenta a aplicabilidade de filmes finos de MnAs/GaAs(001), tornando-o um candidato a aplicações em magnetológica [6, 7] e armazenamento em memória de disco rígido.

A componente da magnetização fora do plano do MnAs/GaAs(001) conforme mostrado na Fig. 3.10 é praticamente constante na faixa de temperatura 300 – 330 K. O interessante é que nesta faixa de temperatura a magnetização fora do plano torna-se

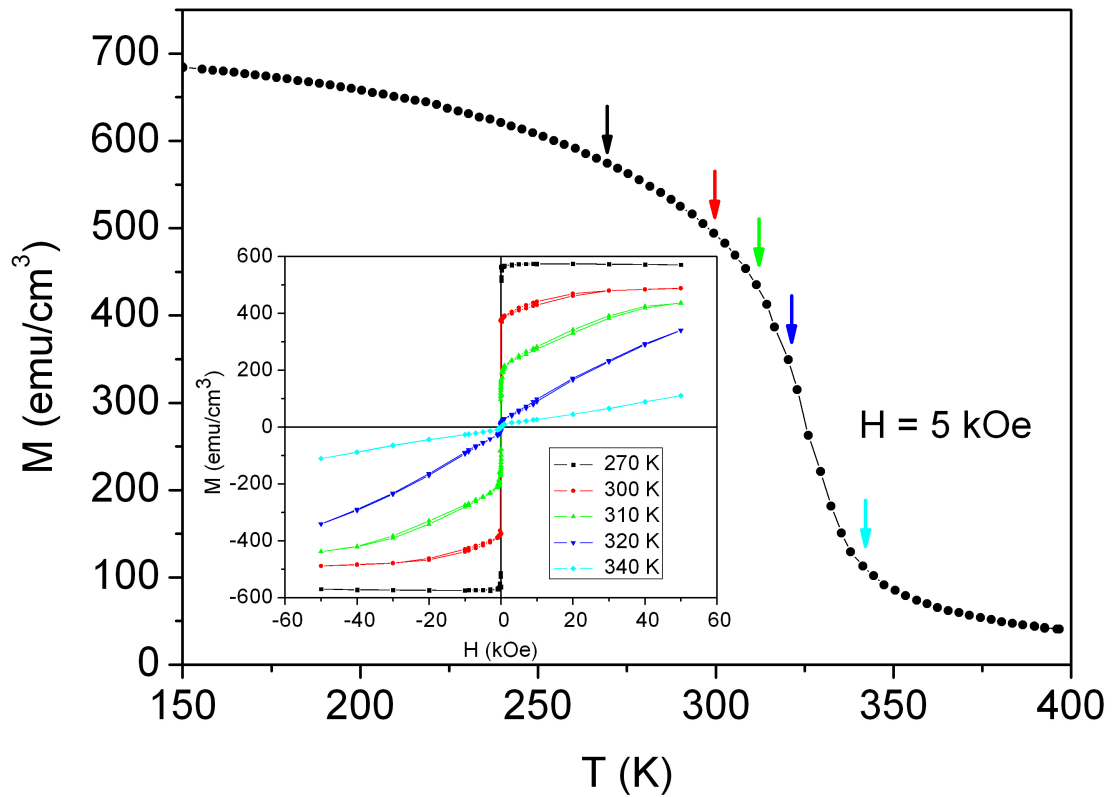


Figura 3.8: Magnetização sob resfriamento em campo magnético como função da temperatura. Também são mostrados ciclos de histerese magnética medidos com o campo aplicado ao longo do eixo fácil para diversas temperaturas indicadas por setas coloridas ao longo da curva de magnetização versus temperatura.

comparável à componente da magnetização no plano, inclusive estando presente no filme quando a componente no plano é nula e somente se anulando a uma temperatura de aproximadamente 333 K. Devido a tal dependência peculiar com a temperatura, tem sido questionada a origem da componente da magnetização fora do plano, pois se a mesma fosse proveniente de uma origem magnetocristalina ou simplesmente de domínios que tem magnetização fora do plano, a mesma tem que se anular na mesma temperatura que a componente no plano da magnetização, o que não ocorre [8]. Por isto é admitido que as componentes estão desacopladas e ainda é discutida a origem da cristalinidade da componente fora do plano.

3.1.1.2 MnAs/GaAs(001) vicinal

Filmes de MnAs foram também crescidos sobre superfície vicinal de GaAs [50]. Uma superfície vicinal de um monocristal é obtida cortando a superfície em um pequeno ângulo relativo a um plano cristalino. Esse ângulo de desalinhamento entre a superfície e o plano cristalino somente pode ser acomodado mediante o aparecimento de terraços

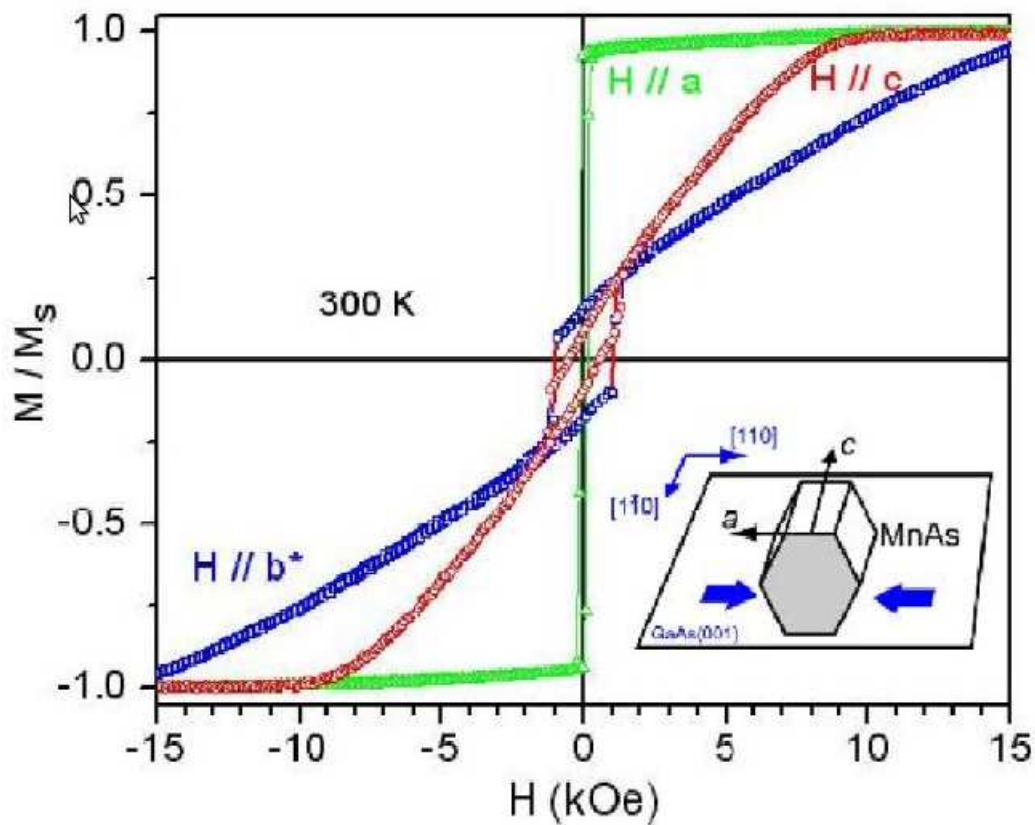


Figura 3.9: Ciclos de histerese magnética para o MnAs/GaAs(001). O campo magnético foi aplicado ao longo de diferentes direções cristalográficas a temperatura ambiente. A direção b^* corresponde a direção normal à superfície do filme. No inset da figura é mostrado o campo de tensão que o MnAs está submetido neste caso.

atômicos formando uma escadaria (ver Fig. 3.11). Tal formação de terraços atômicos melhora a epitaxia do filme.

No trabalho de Graff et al. [50] foi mostrado que o comportamento magnético de superfícies vicinais de MnAs/GaAs é semelhante ao de filmes finos de MnAs crescidos sobre o substrato nominal de GaAs [50].

A Fig. 3.12 mostra curvas de histerese típicos a temperatura de 270 K e 300 K para o MnAs vicinal, os quais foram utilizados para modelar o comportamento magnético de filmes finos de MnAs. No entanto, só um ramo de tal curva é mostrado.

3.1.1.3 Epicamadas de MnAs/GaAs(111)

A relação de epitaxia que o MnAs tem quando é crescido sobre o substrato de GaAs(111) é mostrada na figura 3.13. Neste caso o hexágono de MnAs está de pé sobre o substrato de GaAs(111)B e um campo de tensão biaxial é observado.

Em virtude da adesão do filme ao substrato de GaAs uma tensão é induzida no MnAs. Isto faz com que haja uma energia adicional armazenada na forma elástica. Neste caso há coexistência de fases α e β e a estrutura de domínios consiste de uma rede quase-

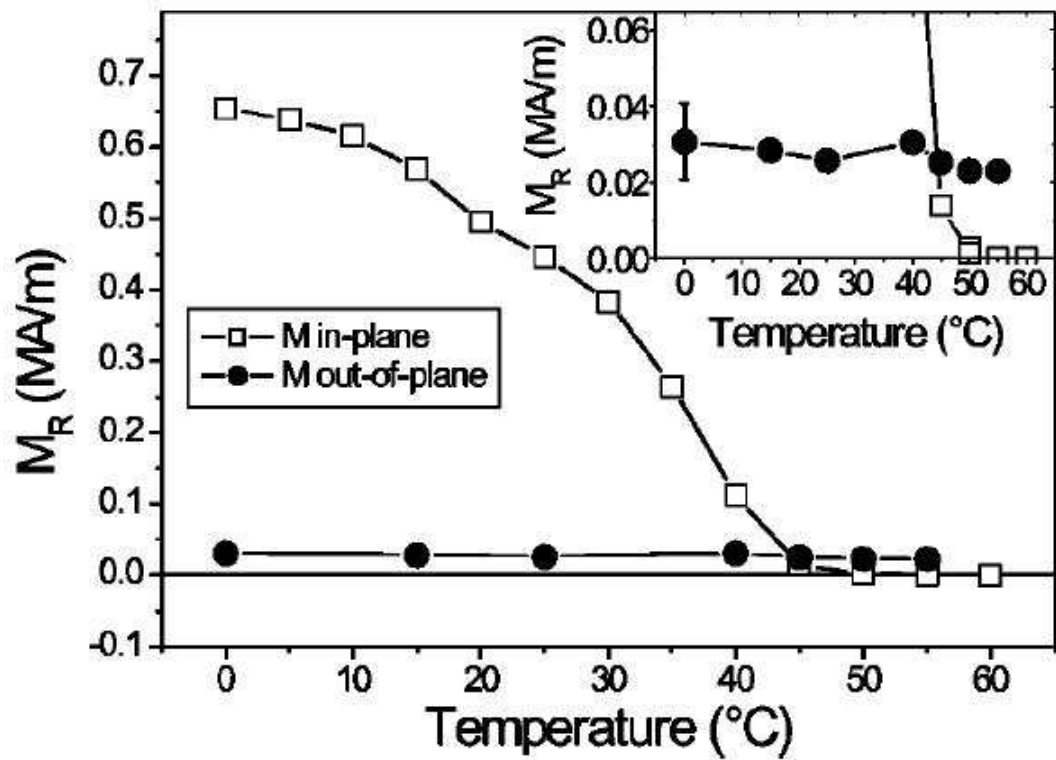


Figura 3.10: Comportamento da componente da magnetização de um filme de MnAs/GaAs(001) sob campo magnético aplicado no plano (denotada por “M in-plane”) e fora do plano (denotada por “M out-of-plane”) com a temperatura. Adaptado da referência [8].

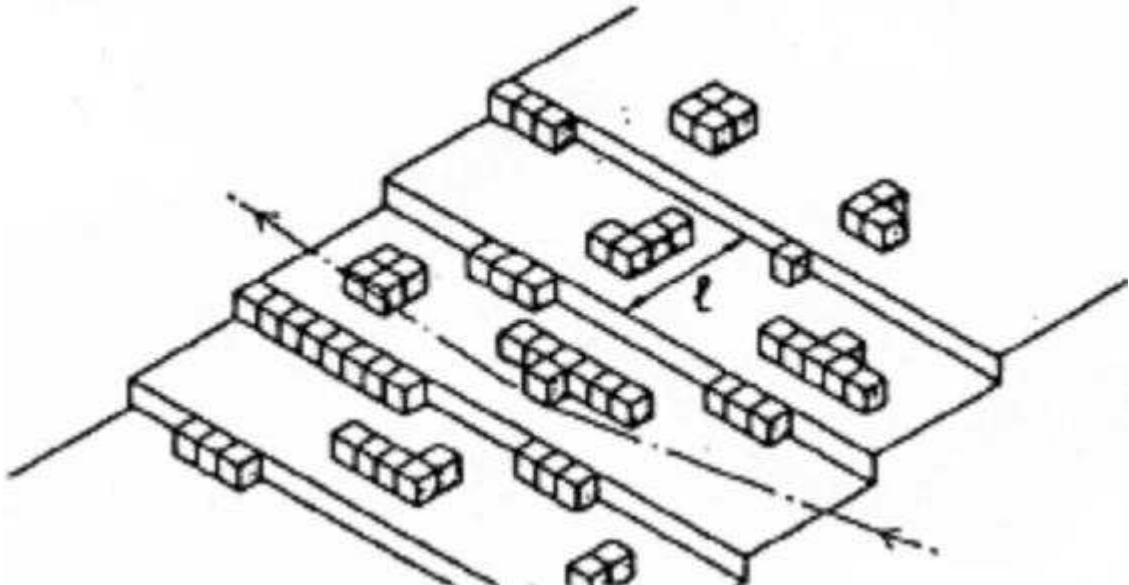


Figura 3.11: Exemplo de superfície vicinal de um substrato onde átomos são depositados. Os terraços atômicos de larra “l” tendem a favorecer a epitaxia de um filme.

hexagonal de α -MnAs separadas por β -MnAs resultando em domínios fechados ou também aparece como um domínio do tipo vórtex ou um tipo “stripe” dependendo da espessura e

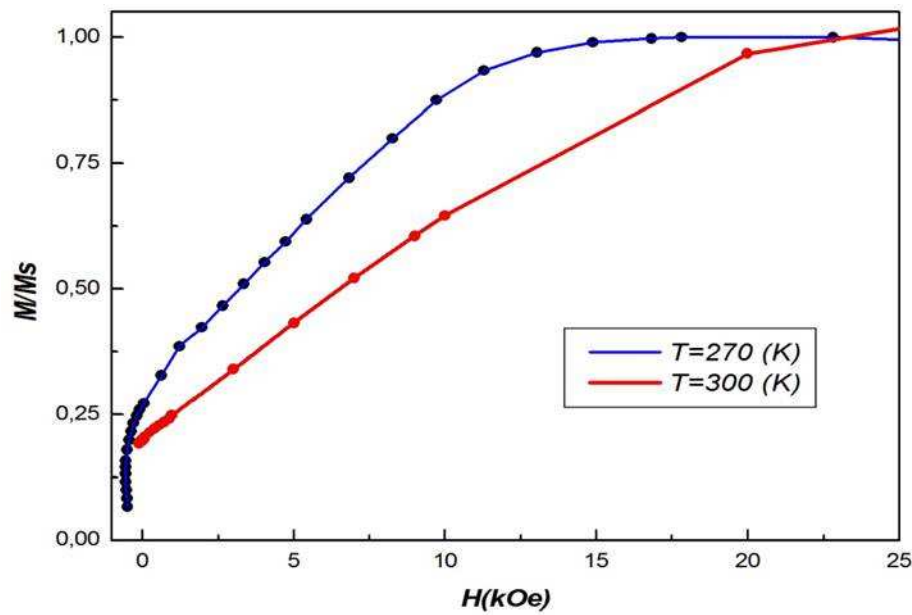


Figura 3.12: Curvas de magnetização para o MnAs vicinal para o eixo intermediário de magnetização. Somente um ramo de saturação é mostrado.

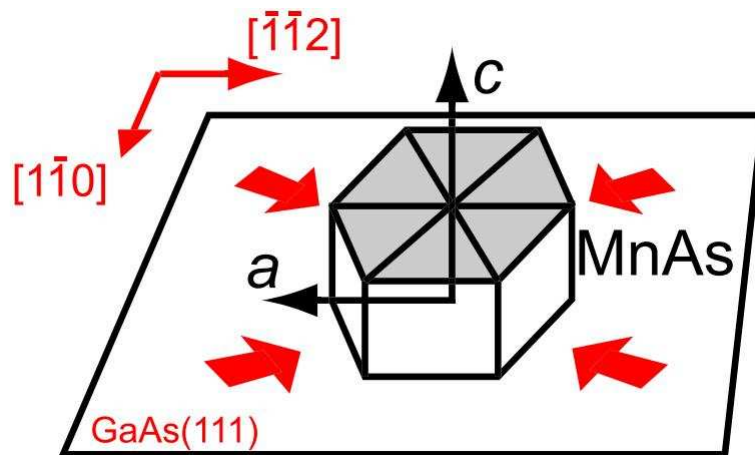


Figura 3.13: Relação de epitaxia do MnAs sobre o substrato de GaAs no caso MnAs/GaAs(111). As setas grandes vermelhas indicam a existência de um campo de tensão compressiva no plano dos filmes.

da estrutura cristalina [51–53].

Para o MnAs/GaAs(111), a tensão a que o filme fino está sujeito por estar aderido ao substrato faz com que a deformação seja biaxial no plano do hexágono. A ação do campo de tensão sobre os vínculos impostos pelas relações epitaxiais origina um efeito dramático na transição de fase. Tal campo de tensão estende a faixa de temperatura que a fase α persiste com ordem ferromagnética [48, 52].

A Fig. 3.14 mostra a dependência com a temperatura da magnetização sob resfriamento em campo magnético de 3 kOe para o MnAs/GaAs(111). Note que a magnetização decresce continuamente e uma transição de fase, com coexistência para uma ampla faixa

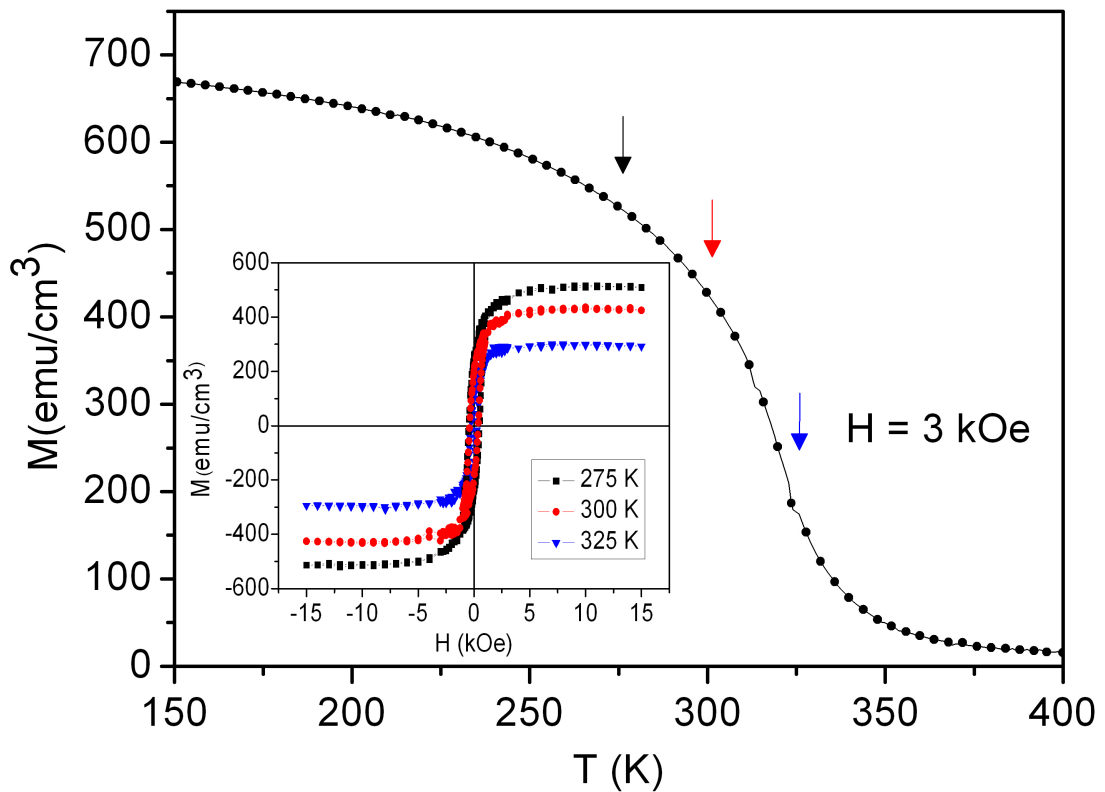


Figura 3.14: Dependência com a temperatura da magnetização sob resfriamento medida a campos de 3 kOe. Também são mostrados ciclos de histerese magnética medidos com o campo aplicado ao longo do eixo fácil para três temperaturas assinaladas por setas na curva da magnetização versus temperatura.

de temperatura de fases ferro e paramagnéticas, de segunda ordem é observada. A parte interna de tal figura mostra ciclos de histerese magnética medidas em temperaturas em torno da transição de fase magnetoestrutural com o campo magnético aplicado ao longo do eixo magneticamente fácil do filme.

A Fig. 3.15 mostra ciclos de histerese medidos a temperatura ambiente com campos magnéticos aplicados ao longo de diferentes direções cristalográficas para o MnAs/GaAs(111). Quando o campo magnético é aplicado ao longo da direção $H//a$ ou $H//b$, percebemos um plano fácil de magnetização, com campos de poucos Oersteds necessários para saturar a magnetização. Aplicando campo magnético de ao longo de c temos a curva de difícil magnetização, com campos de 0.5 T necessários para saturar a magnetização ao longo desta direção. A parte interior da figura mostra as direções cristalográficas ao longo das quais os campos magnéticos foram aplicados com relação a célula hexagonal da estrutura do cristal.

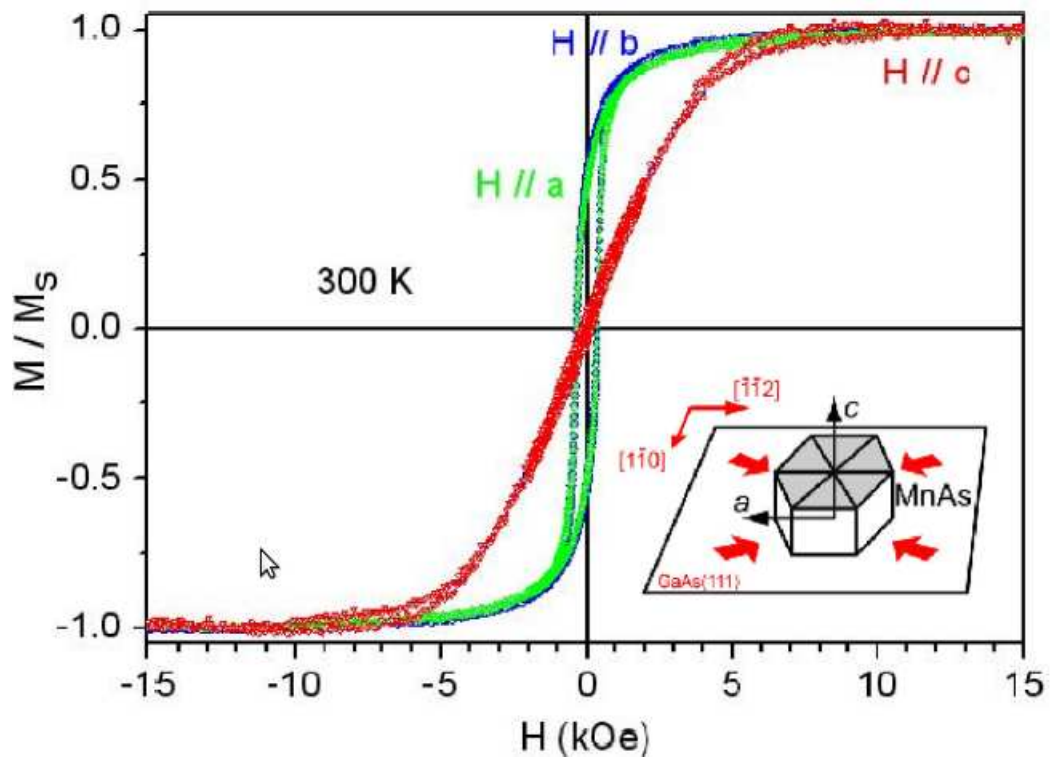


Figura 3.15: Ciclos de histerese magnética para o MnAs/GaAs(111)B. O campo magnético foi aplicado ao longo de diferentes direções cristalográficas a temperatura ambiente. Podemos notar que temos um plano de fácil magnetização (correspondendo a $H//a$ ou $H//b$) e um eixo de difícil magnetização correspondendo a campos aplicados ao longo da direção c . O inset da figura mostra o campo de tensão que o MnAs neste caso está submetido, que é biaxial.

3.2 Crescimento de epicamadas de MnAs

A seguir daremos uma breve introdução sobre o crescimento de epicamadas de MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111).

Mais detalhes sobre o crescimento de amostras de MnAs/GaAs(001) podem ser encontrados nas referências [54, 55] e para filmes MnAs/GaAs(111) nas referências [14, 52, 56]. Ambos os tipos de epicamadas MnAs/GaAs estudados neste trabalho foram crescidos no laboratório do Dr. Victor Hugo Etgens do Institut de NanoSciences de Paris, uma unidade mista de pesquisa vinculada ao CNRS e a Université Pierre et Marie Curie.

3.2.1 Crescimento de amostras

Filmes cristalinos de MnAs foram crescidos em substratos de GaAs(001) e GaAs(111) (Si-doped 10^{18} cm^{-3}) por epitaxia de feixe molecular ou MBE (do inglês “Molecular Beam Epitaxy”). Os substratos foram desoxidados sob fluxo de As e uma camada “buffer” de GaAs foi crescida subsequentemente a 580° C em condições de As rico para conseguir uma qualidade de superfície otimizada, a qual foi confirmada por diagramas de difração

de reflexão de elétrons de alta energia ou RHEED (do inglês, reflection high-energy electron diffraction). Epicamadas de 70 nm foram então crescidas a 260° C nestas superfícies de GaAs com reconstruções de superfície (2×2) para o GaAs(111)B e $c(4 \times 4)$ para o GaAs(001). As relações de epitaxia foram determinadas por medidas de RHEED e difração de raio X ou XRD (do inglês X-Ray Diffraction).

Filmes de MnAs mostram uma relação de epitaxia com o eixo c do hexágono ao longo da direção de crescimento para o substrato GaAs(111), enquanto que o eixo c do hexágono está ao longo da direção (110) para o substrato GaAs(001).

Amostras com tamanhos entre 36 e 56 mm² com uma camada protetora foram removidos de condições de ultra vácuo antes de cada medida magnética. A espessura de filmes de MnAs foi determinada por análises de microscopia de secção transversal de transmissão de elétrons ou TEM (do inglês Transmission Electron Microscopy). Magnetômetro SQUID (do inglês Superconducting Quantum Interference Device) e magnetômetros de gradiente de força alternante ou AGFM (do inglês Alternating Gradient Force Magnetometers) foram usados para realizar medidas magnéticas aplicando campo magnético ao longo de diferentes orientações dos filmes. Mais detalhes sobre caracterizações magnéticas e estruturais destas amostras podem ser encontradas nas referências [4, 57, 58].

Resultados e discussões

Neste capítulo apresentaremos a modelagem utilizada e os resultados obtidos para descrever a histerese magnética de epicamadas de MnAs utilizando as fontes de anisotropia inerentes, também mostraremos uma modelagem auto-consistente para descrever a histerese magnética de ambas as epicamadas de MnAs (correspondendo às epicamadas de MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111)B), a qual é baseada em uma generalização do modelo SW [20, 37]. Vale citar que o nosso modelo é o modelo mínimo para descrever a histerese das epicamadas, sendo que a não inclusão de qualquer uma das fontes anisotrópicas compromete os resultados obtidos. Em seguida apresentaremos, discutiremos e interpretaremos os resultados das simulações.

4.1 Modelagem para epicamadas de MnAs

Procuramos um modelo auto-consistente, no sentido de modelar ambas as epicamadas de MnAs, que possa descrever bem os ciclos de histerese, tanto quanto as propriedades magnéticas de epicamadas de MnAs. Utilizamos epicamadas de MnAs com 70 nm de espessura, mas podemos estender nossos resultados e conclusões para epicamadas de MnAs com espessura entre 50 e 100 nm. Baseados na literatura, incluímos fontes de anisotropia magnética realísticas; isto é, resultados experimentais que mostraram-se consistentes em meio aos relatos previamente publicados por diferentes grupos de pesquisa. Montamos uma densidade de energia livre magnética capaz de descrever adequadamente o comportamento magnético dos ciclos de histerese em diferentes temperaturas ao redor da transição magnetoestrutural. São adotados os mesmos termos de energia de anisotropia magnética para as epicamadas MnAs/GaAs(111) e MnAs/GaAs(001).

Na nossa modelagem utilizamos uma extensão do modelo de Stoner-Wohlfarth para a histerese magnética, que trata a magnetização de uma amostra como um monodomínio coerente e não interagente. No entanto, ressaltamos que apesar de

que em nossas epicamadas estejam presentes ambas as fases α e β , a nossa abordagem de monodomínio coerente e não interagente ainda é válida. As figuras 4.1 e 4.2 mostram a estrutura de domínios, de vista lateral do filme de MnAs, para as epicamadas de MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111)B, respectivamente. Ressaltamos que a fase β do filme de MnAs é considerada como sendo paramagnética, não contribuindo para o sinal magnético do sistema. Assim, podemos tratar a magnetização de ambos os sistemas como monodomínios, uma vez que a cristalinidade dos filmes é alta.

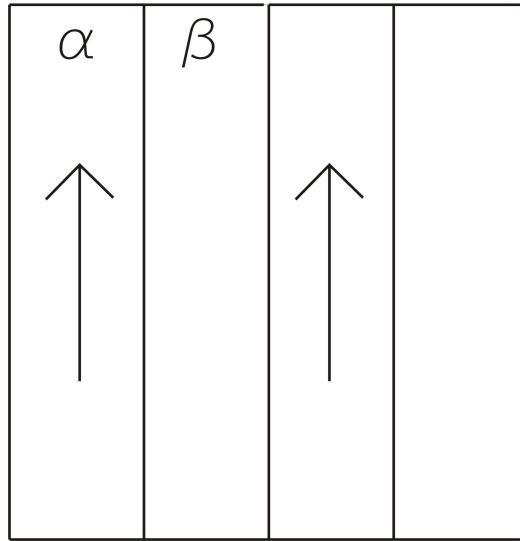


Figura 4.1: Vista lateral dos domínios α e β presentes em uma amostra de MnAs/GaAs(001). A figura mostra as “stripes” α e β do MnAs. A fase α e β do MnAs são consideradas como sendo ferromagnética e paramagnética, respectivamente. Como a fase β do MnAs é paramagnética, ela não contribui para a resposta magnética total do sistema a baixos campos. Então, com intuito de modelar a histerese magnética, podemos considerar o filme como um monodomínio ferromagnético homogêneo.

Apesar de aproximações teóricas já terem sido usadas para descrever o processo de magnetização de epicamadas de MnAs sobre GaAs muitas questões ainda estão em aberto. Em particular, histerese magnética e simulações foram estudadas por diversos grupos usando diferentes técnicas [16, 59, 60]. Em especial, nenhum modelo até o presente momento foi capaz de descrever consistentemente o comportamento histerético de ambas as epicamadas de MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111)B para uma ampla faixa de temperatura.

Com o intuito de utilizar as mesmas coordenadas esféricas para epicamadas de MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111), usamos as coordenadas esféricas da Fig. 2.2 adaptando as coordenadas, quando necessário, ao problema.

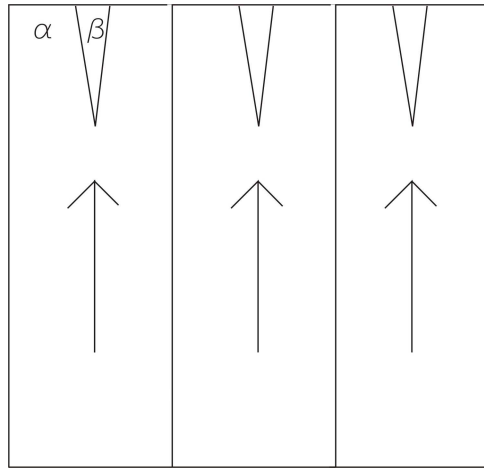


Figura 4.2: Vista lateral dos domínios α e β presentes em uma amostra de MnAs/GaAs(111)B. A figura mostra como se dispõem as fases α e β . Observe que temos fases β dispostas em forma de agulha ao longo do filme. A fase α e β do MnAs são consideradas como sendo ferromagnética e paramagnética, respectivamente. Como a fase β do MnAs é paramagnética, ela não contribui para a resposta magnética total do sistema a baixos campos. Então, com intuito de modelar a histerese magnética, podemos considerar o filme como um monodomínio ferromagnético homogêneo.

4.2 Procedimento das simulações

As simulações dos ciclos de histerese magnética foram efetuadas utilizando o software Mathematica 5.2.

Para simular a histerese magnética conforme um modelo baseado no SW [20], montamos a energia livre do sistema e minimizamos a energia com respeito aos ângulos esféricos θ e ϕ . Então, desenvolvemos um código simples (em Mathematica 5.2) para minimizar uma função e por meio de critérios matemáticos, encontrando assim seus máximos e mínimos mediante às devidas condições, selecionando o mínimo global. Para um dado valor do campo magnético externo, H , achamos o mínimo local, armazenamos numa lista tal valor de campo e a magnetização de equilíbrio correspondente. Em seguida aumentamos (ou diminuímos) a intensidade do campo magnético, achando um novo valor para a magnetização de equilíbrio e armazenando-o numa nova lista. Em geral, foram usados 1000 passos para uma boa simulação, demorando no máximo alguns minutos para que o procedimento seja efetuado usando um processador intel dual core 2.6 Ghz. No entanto, se aumentarmos o número de passos de uma ordem de grandeza, ou seja, se usamos em torno de 10 mil passos, as simulações demoram horas para ser efetuadas, mas a forma dos ciclos são as mesmas. Para este modelo precisão numérica não tem um papel importante, sendo que cerca de 1000 passos basta para uma boa simulação.

Para verificar a validade dos nossos códigos para histerese magnética, reproduzimos com êxito os resultados apresentados no trabalho [61]. Os resultados obtidos por tal grupo são mostrados na Fig. 4.3.

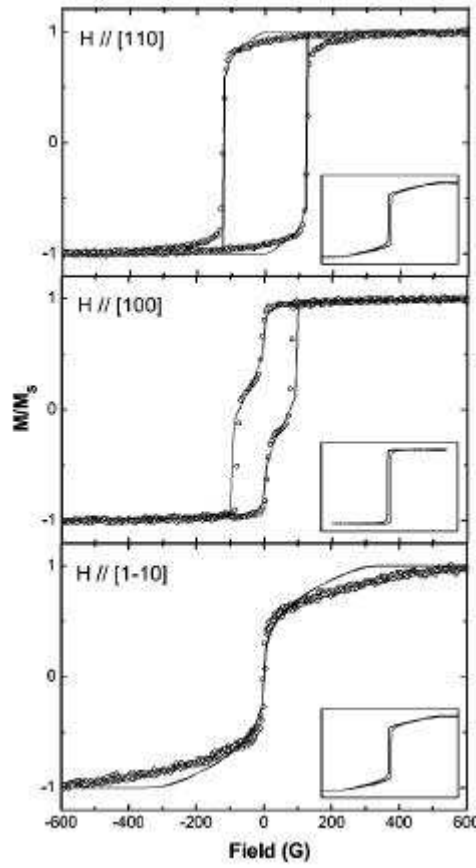


Figura 4.3: Simulações obtidas usando um modelo de Stoner-Wohlfarth implementado para descrever o comportamento magnético de filmes de Fe/ZnSe(001) ao longo de três direções cristalográficas. Extraído da Ref. [61].

4.3 Modelagem para epicamadas de MnAs/GaAs(001)

A figura 3.5 mostra como é a relação de epitaxia do MnAs no substrato de GaAs no caso MnAs/GaAs(001).

Para uma descrição matemática da energia livre precisamos adequar as coordenadas hexagonais do MnAs às do substrato (ver Fig. 2.2). Para isto usamos a seguinte relação entre os cossenos diretores do hexágono e as coordenadas esféricas utilizadas: $\alpha_1 = \sin \theta \cos \phi$, $\alpha_2 = \cos \phi \cos \theta$, e $\alpha_3 = \sin \phi$.

Como tal sistema apresenta na coexistência de fases uma configuração de domínios de prismas compridos com fases alternadas α -MnAs e β -MnAs, usamos a modelagem do capítulo 2 para descrever a energia desmagnetizante (ver equações 2.10 e 2.11), usamos anisotropia cristalina em primeira e segunda ordem (ver equação 2.4), energia elástica e magnetoelástica (ver capítulo 2 equações 2.12 e 2.13) e os termos de distorção ortorrômica e hexagonal (ver capítulo 2, seção 2.1.7.1). As energias livres foram adequadas às coordenadas esféricas do substrato.

Sendo assim, a energia livre total magnética é descrita por:

$$F_{001} = F_z - K_1 \cos^2 \phi + \frac{N_{out}}{2} M_s^2 \cos^2 \theta + \frac{N_{in}}{2} M_s^2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + B_1(\epsilon_1 - \epsilon_2) \sin^2 \theta \cos^2 \phi - [B_2 \epsilon_3 + B_3(\epsilon_1 + \epsilon_2) + B_1 \epsilon_2] \sin^2 \phi + K_2 \cos^4 \phi + K_2^o \sin^4 \theta. \quad (4.1)$$

Na energia livre acima o primeiro termo corresponde a energia de interação Zeeman, o segundo à anisotropia magnetocristalina, o terceiro e o quarto às energias desmagnetizantes, o quinto e o sexto às interações magnetoelásticas, o penúltimo à anisotropia magnetocristalina de segunda ordem e o último à distorção ortorrômbica.

4.3.1 Modelagem para epicamadas de MnAs/GaAs(111)

A Fig. 3.13 mostra como é a relação de epitaxia do MnAs no substrato de GaAs no caso MnAs/GaAs(111). Neste caso as coordenadas do hexágono já estão adequadas com as coordenadas esféricas do substrato. Assim, os cossenos diretores são dados por: $\alpha_1 = \sin \theta \cos \phi$, $\alpha_2 = \sin \theta \sin \phi$ e $\alpha_3 = \cos \theta$.

Para este sistema usamos na coexistência de fases a modelagem de amostra elipsoidal do capítulo 2 para descrever a energia desmagnetizante (ver equações 2.8 e 2.9), usamos anisotropia cristalina em primeira e segunda ordem (ver seção 2.4), energia elástica e magnetoelástica (ver capítulo 2 e as equações 2.12 e 2.13) e os termos de distorção ortorrômbica e hexagonal (ver capítulo 2 a seção 2.1.7.1).

As energias livres foram adequadas às coordenadas esféricas do substrato. Sendo assim, a energia livre total é descrita por:

$$F_{111} = F_z - (K_1 + 2\pi M_s^2) \sin^2 \theta + [\epsilon_1(B_1 + 2B_3) + \epsilon_3 B_2] \sin^2 \theta + K_2^o \cos^4 \phi + K_2 \sin^4 \theta. \quad (4.2)$$

Na energia livre acima o primeiro termo corresponde à interação Zeeman, em seguida aparece a contribuição magnetocristalina de primeira ordem e a desmagnetizante, o terceiro termo corresponde às interações magnetoelásticas, por penúltimo a distorção ortorrômbica e por último a anisotropia magnetocristalina de segunda ordem. Vale ressaltar na equação acima que deixamos a anisotropia magnetocristalina na forma: $-K_1 \sin^2 \theta$, pois assim admitimos que K_1 é positivo.

4.4 Metodologia e parâmetros utilizados

Nesta seção apresentamos os parâmetros utilizados na modelagem de epicamadas de MnAs e a metodologia das simulações. Na seção seguinte mostraremos os resultados

das simulações mediante ao uso dos nossos parâmetros e será discutida a implicação dos parâmetros aqui introduzidos ao leitor.

Neste trabalho apresentamos um modelo baseado na rotação coerente da magnetização para auto-consistentemente descrever as curvas de histerese de ambas as epicamadas de MnAs.

Tabela 4.1: Magnetização de saturação, M_s , constantes de anisotropia magnetocristalinas de primeira e segunda ordem, K_1 [62] e K_2 , largura das “stripes” α do MnAs, w , e o fator desmagnetizante fora do plano, N_{out} , para algumas temperaturas para o MnAs.

T(K)	M_s (emu/cm ³)	K_1 ($\times 10^5$ J/m ³)	K_2 ($\times 10^5$ J/m ³)	w (nm)	$N_{out}/4\pi$
77	870	12.0	-	-	1.0
270	770	9.0	0.4	-	1.0
300	530	7.6	0.6	300	0.72
310	300	5.5	0.9	250	0.69

Nosso modelo leva em conta termos de energia livre magnetoelástica e magnetostriativa derivadas de primeiros princípios atomísticos [10, 11, 22, 33, 58]. Dados experimentais disponíveis na literatura são usados como parâmetros para termos de anisotropia magnética na densidade de energia livre para simular os ciclos de histerese. Essencialmente, a dependência com a temperatura do parâmetros de rede e da fração α juntamente com a mudança da magnetização de saturação durante a transição magnetoestrutural de epicamadas de MnAs são autoconsistentemente introduzidos.

Tabela 4.2: Valores das constantes de acoplamento magnetoelástico (B_i) para o MnAs obtidos por ajuste de curvas. O valor experimental da curva de tensão induzida por campo ($\Delta\sigma_{i,exp}^j$) e o calculado pelo nosso modelo ($\Delta\sigma_{i,model}^j$) são mostrados. Aqui $\Delta\sigma_a^b$ ($\Delta\sigma_a^c$) corresponde a variação de tensão necessária para girar a magnetização do eixo fácil para o eixo intermediário (eixo difícil).

T(K)	B_1 (MJ/m ³)	B_2 (MJ/m ³)	B_3 (MJ/m ³)	$\Delta\sigma_{a,exp}^b$ (MPa)	$\Delta\sigma_{a,model}^b$ (MPa)	$\Delta\sigma_{a,exp}^c$ (MPa)	$\Delta\sigma_{a,model}^c$ (MPa)
270	-6.6	0.4	-2.0	8.2	8.2	8.1	8.1
283	-6.6	0.4	-2.0	8.2	8.2	8.1	8.1
300	167.0	-88.6	-156.0	-30.0	-210.0	-50.0	-50.0
310	135.0	-83.0	-135.0	-60.0	-170.0	-60.0	-33.0

A existência de domínios magnéticos na forma de “stripes” [16, 59, 60] no sistema MnAs/GaAs(001) foram também levados em conta na energia desmagnetizante como domínios ferromagnéticos na forma de prismas, cujas dimensões dependem da temperatura. Os fatores desmagnetizantes foram obtidos consistentemente usando as equações 2.9 e 2.10 com valores médios dos tamanhos e comprimentos dos domínios de “stripes” α para cada temperatura a partir de medidas de Microscopia de Tunelamento ou STM (do inglês

Tabela 4.3: Valores das deformações para epicamadas de MnAs sobre GaAs. A deformação da rede ϵ_i na notação de Voigt foi obtida dos dados experimentais das referências [13, 19].

T(K)	MnAs/GaAs(111)		MnAs/GaAs(001)		
	$\epsilon_1 = \epsilon_2$ (%)	ϵ_3 (%)	ϵ_1 (%)	ϵ_2 (%)	ϵ_3 (%)
270	-0.80	0.00	-0.80	-0.15	1.10
300	-0.53	0.00	-0.20	-0.15	0.83
310	-0.40	0.00	≈ 0.00	-0.20	0.74

Scanning Tunneling Microscopy). A média das larguras das “stripes” α como função da temperatura foram obtidas de imagens STM usando o código WSxM [63]. Dados experimentais de trabalhos experimentais recentes da equipe do Dr. Victor Hugo Etgens do INSP foram usadas para estimar os tamanhos das “stripes” ferromagnéticas [50, 64].

Utilizando parâmetros disponíveis na literatura, usamos o valor da constante de anisotropia magnetocristalina conforme medida em trabalhos anteriores [62], como parâmetro livre para ajuste das curvas de magnetização ajustamos consistentemente as constantes de acoplamento magnetoelásticos, B_i , para reproduzir as curvas de magnetização das epicamadas de MnAs. Para avaliarmos a plausibilidade das constantes magnetoelásticas, usamos as equações da seção 2.1.8 para estimarmos teoricamente a influência do acoplamento magnetoelástico na tensão induzida mediante rotação da magnetização para diferentes direções cristalográficas. A seguir, comparamos o valor obtido teoricamente com os dados experimentais para filmes de 60 nm da tensão induzida por campo magnético (do inglês “field-induced stress”), conforme medido por Yamaguchi e colaboradores [34].

As tabelas 4.1, 4.2 e 4.3 mostram os parâmetros utilizados nas simulações de epicamadas de MnAs/GaAs.

A tabela 4.1 mostra para algumas temperaturas a magnetização de saturação, M_s , retiradas das curvas de magnetização do eixo fácil; as constantes de anisotropia magnetocristalina de primeira e segunda ordem, K_1 e K_2 , retiradas da referência [62]; a largura das “stripes” α do MnAs, denotada por w , que vêm de nossos dados experimentais; e o fator desmagnetizante fora do plano N_{out} calculado a partir dos nossos dados experimentais para o valor médio das “stripes” α do MnAs, denotado por w .

A tabela 4.2 mostra os acoplamentos magnetoelásticos, os quais são parâmetros que foram obtidos a partir de ajuste de curvas. Também é mostrado o valor experimental da tensão induzida por campo ($\Delta\sigma_{i,exp}^j$) e o calculado pelo nosso modelo ($\Delta\sigma_{i,model}^j$). Na notação utilizada $\Delta\sigma_a^b$ ($\Delta\sigma_a^c$) corresponde a variação de tensão necessária para girar a magnetização do eixo fácil para o eixo intermediário (eixo difícil). Note que temos um bom acordo entre o resultado experimental ($\Delta\sigma_{a,exp}^c$) e o teórico ($\Delta\sigma_{a,model}^c$) para campos aplicados ao longo do eixo c do hexágono. Para campos magnéticos ao longo da direção b

do hexágono não há um bom acordo entre predição teórica ($\Delta\sigma_{a,model}^b$) e valor experimental ($\Delta\sigma_{a,exp}^b$). Isto é devido a existência de uma componente de magnetização fora do plano e a tensão devida a conversão da fase β para a fase α .

Na tabela 4.3 são mostrados os valores das deformações para epicamadas de MnAs. As Figs. 4.4 e 4.5 mostram graficamente a dependência dos parâmetros de rede das epicamadas de MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111)B, respectivamente, em função da temperatura. Os valores pertinentes às simulações das deformações na notação de Voigt são mostrados para os sistemas MnAs/GaAs(111)B e MnAs/GaAs(001), as quais foram obtidas das referências [13] e [19] para cada sistema respectivamente.

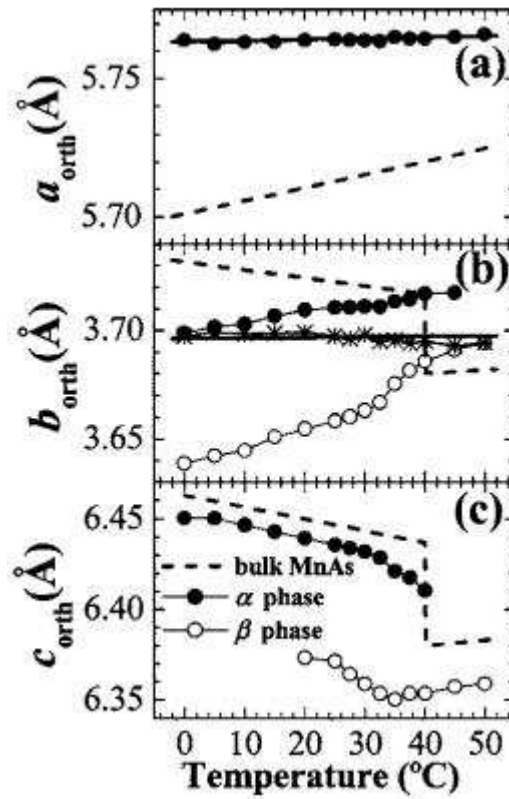


Figura 4.4: Dependência com a temperatura dos parâmetros de rede para o filme massivo e para as fases α e β para epicamadas de MnAs/GaAs(001). Extraído da Ref. [19].

4.5 Resultados e discussão das simulações das epicamadas de MnAs

Ambas as epicamadas de MnAs, correspondendo a MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111), foram auto-consistentemente modeladas durante e abaixo da transição de fase magneto-estrutural. Os parâmetros que otimizaram as simulações foram mostrados na seção 4.4. Aqui apresentaremos os resultados das simulações, discutiremos os parâmetros utilizados e suas implicações físicas.

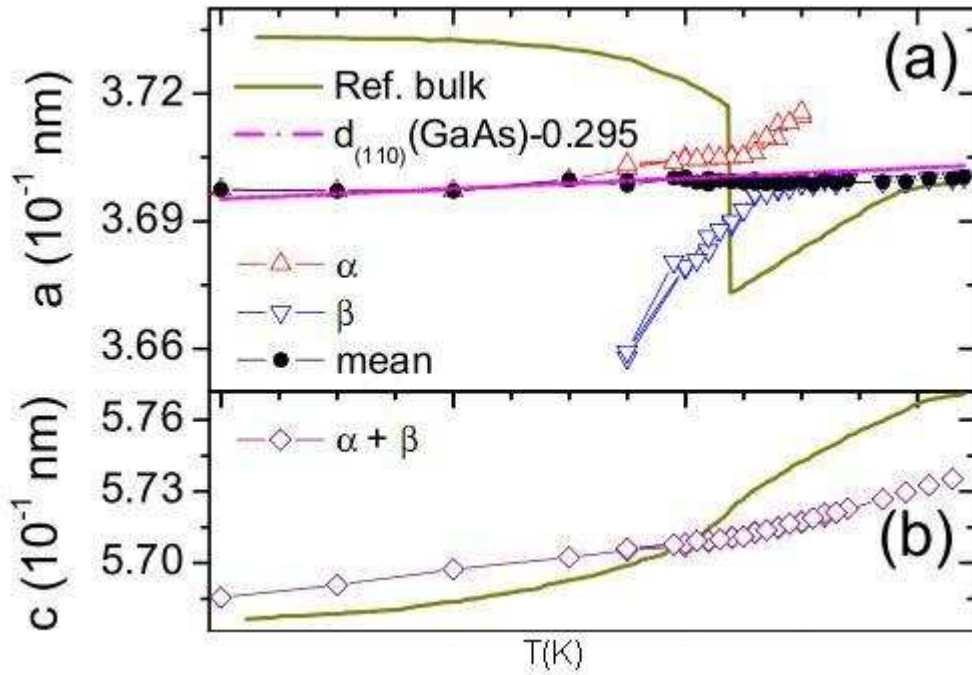


Figura 4.5: Dependência com a temperatura dos parâmetros de rede para o filme massivo e para as fases α e β para epicamadas de MnAs/GaAs(111)B. Extraído da Ref. [13].

As Figs. 4.6 e 4.7 mostram os resultados do nosso modelo para simular a histerese magnética do sistema ferromagnético MnAs/GaAs(001). Tais figuras mostram os resultados das simulações para diversas temperaturas para os eixos magneticamente fácil e difícil, respectivamente. As simulações também foram efetuadas para o eixo intermediário de magnetização. Mostramos esses resultados somente para o ramo de saturação de magnetização na Fig. 4.8.

Ciclos de histerese foram simulados para o campo magnético externo, H , aplicado paralelo: ao eixo magneticamente fácil, correspondendo a direção [110] do substrato de GaAs; ao eixo intermediário de magnetização, correspondendo a direção [001] do substrato de GaAs; ao eixo magneticamente difícil, correspondendo a direção $[1\bar{1}0]$ do substrato de GaAs.

Vale citar que os nossos dados experimentais para a histerese ao longo do eixo de difícil magnetização exibem uma pequena descontinuidade ao redor dos campos coercivos a 270 K (ver Figs. 4.7 e 3.9). Contudo, esta descontinuidade não foi relatada por outros grupos [15, 34]. Nós atribuímos isto a uma característica particular das nossas amostras a 270 K. Tal descontinuidade ao redor dos campos coercivos não está mais presente em altas temperaturas (ver Fig. 3.9). No entanto, o campo de saturação, são os mesmos que os relatados por outros grupos [15, 34].

As simulações para o eixo magneticamente difícil passam pela origem uma vez que o campo coercivo não pode ser corretamente simulado a partir de um modelo simples. Nossas simulações para o eixo fácil dão um campo coercivo uma ordem de magnitude

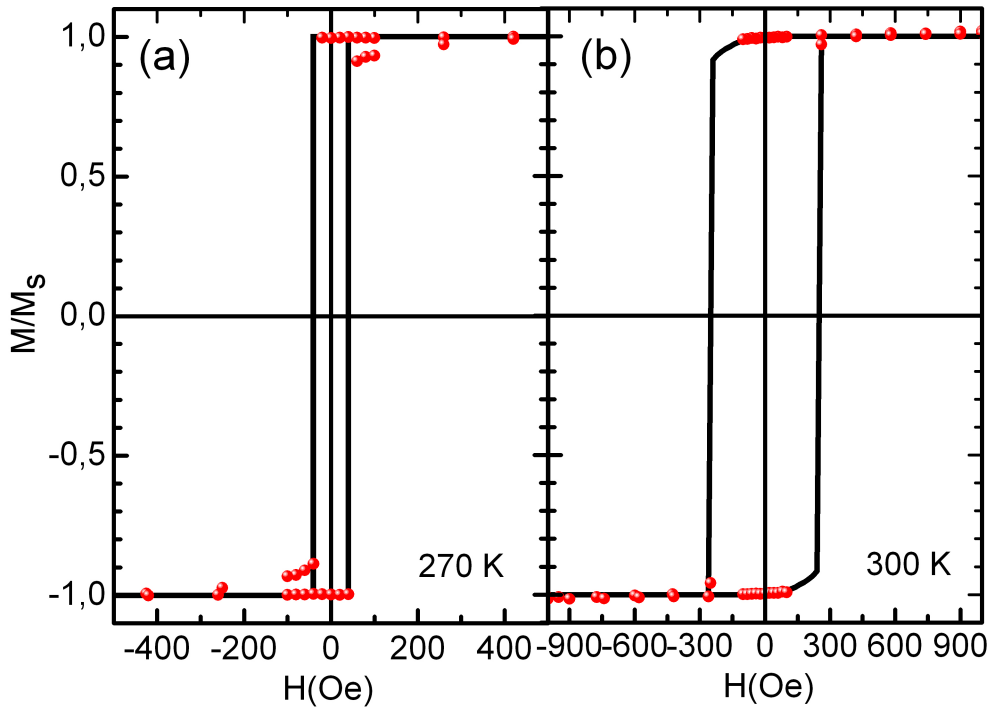


Figura 4.6: Ciclos de histerese obtidos com o campo magnético externo aplicado ao longo do eixo fácil de magnetização de epicamadas de MnAs/GaAs(001) para duas temperaturas: (a) 270 K e (b) 300 K. Círculos vermelhos são dados experimentais e as linhas cheias são os resultados das simulações.

maior que o obtido experimentalmente. Para mostrarmos um ajuste das curvas, procedemos um arraste numericamente perto a $4\pi M_s$. De fato, campo coercivo é uma propriedade extrínseca e uma grande dispersão de campos coercivos para diferentes amostras tem sido encontrada [48]. Em um trabalho anterior, uma distribuição gaussiana de terraços foi levada em conta para simular o comportamento histerético [16]. Do mesmo modo, os autores realizaram um procedimento de arraste dos ciclos para ajustar curvas simuladas a curvas experimentais. Contudo, no trabalho deles não foi levado em conta a anisotropia magnetocristalina, a qual é responsável pelo eixo magneticamente fácil do MnAs/GaAs(001) e é muito mais forte que a energia desmagnetizante máxima ($K_1 = 7.6 \times 10^5 \text{ J/m}^3$ e $E_d = 2\pi M_s^2 \approx 2 \times 10^6 \text{ J/m}^3$, respectivamente). Deste modo, o comportamento da magnetização é principalmente devido à atuação da anisotropia magnetocristalina.

A anisotropia de epicamadas de MnAs/GaAs(001) foi estudada em detalhes por Linders e colaboradores [65], os quais mostraram que a constante de anisotropia de primeira ordem, K_1 , para o MnAs/GaAs(001) tem valor próximo ao do filme massivo. No entanto, no trabalho deles foi usada uma magnetização de saturação 20 % maior do que a medida a temperatura de 293 K. Este parâmetro não realístico pode estar superestimando e escondendo outras contribuições de anisotropia atuando no sistema. O presente trabalho mostra que a anisotropia magnetoelástica é responsável por um termo de anisotropia

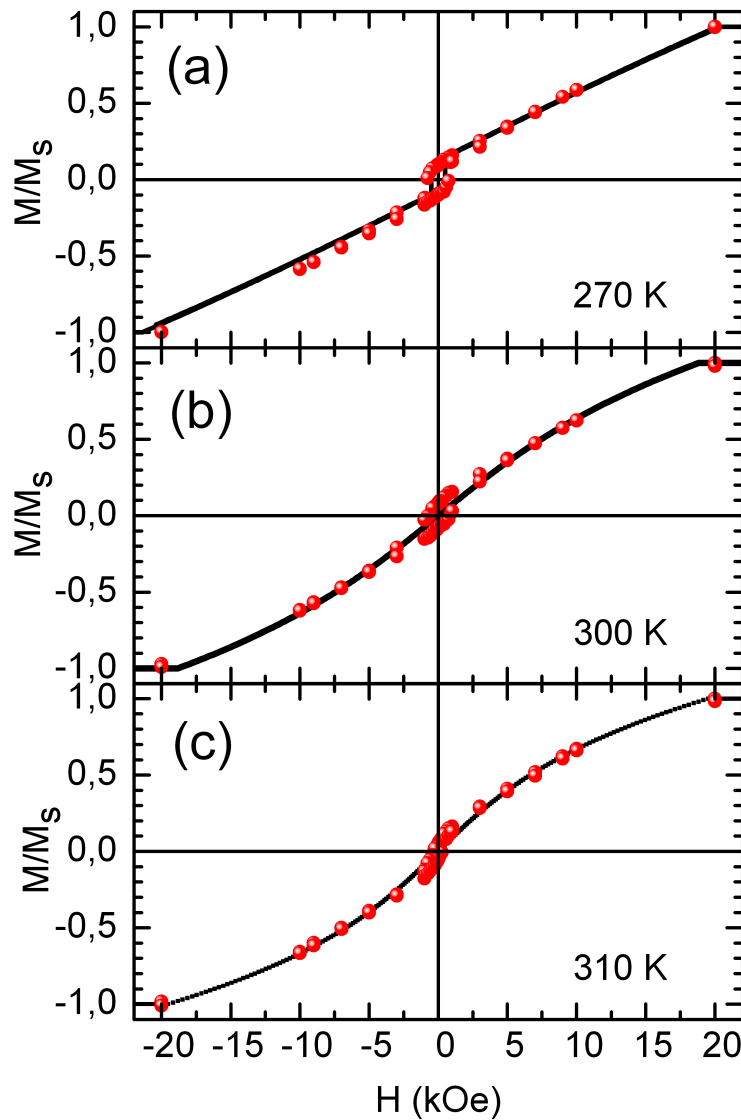


Figura 4.7: Ciclos de histerese magnética obtidos com o campo magnético aplicado ao longo do eixo de difícil magnetização de epicamadas de MnAs/GaAs(001) para três temperaturas: (a) 270 K, (b) 300 K, and (c) 310 K. Círculos vermelhos são os dados experimentais e as linhas cheias são os resultados das simulações.

no plano do MnAs/GaAs(001).

Experimentos mostram que a saturação ocorre a campos de aproximadamente 1 T a 270 e 300 K. A 270 K a energia desmagnetizante pode completamente explicar o campo de saturação ($4\pi M_s$) e a anisotropia magnetoelástica é negligenciável a esta temperatura. A temperatura ambiente, a energia desmagnetizante não pode explicar completamente a histerese fora do plano, uma vez que M_s diminui e o campo de saturação permanece o mesmo com o aumento da temperatura. Podemos explicar isto em nosso caso admitindo que a anisotropia magnetoelástica contribui significativamente para manter o campo de

saturação em 1 T.

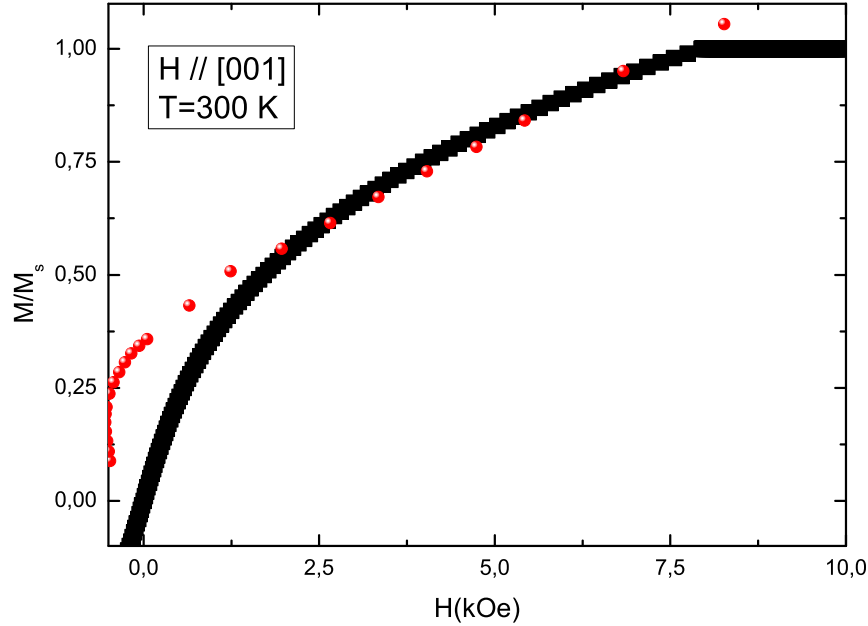


Figura 4.8: Curva de magnetização e a respectiva simulação obtida para o campo magnético aplicado paralelo ao eixo intermediário. A linha cheia corresponde à simulação, enquanto que os círculos vermelhos são os dados experimentais. Note que a simulação teórica dá uma remanência nula, enquanto que o dado experimental dá uma remanência diferente de zero. Tal remanência não nula medida experimentalmente é devida a existência da componente fora do plano e de domínios B na amostra.

Os resultados do nosso modelo para histerese magnética para epicamadas de MnAs/GaAs(111) são mostrados na Fig. 4.9. O campo magnético externo foi aplicado ao longo do plano magneticamente fácil, o qual corresponde ao plano que contém as direções $[110]$ e $[1\bar{1}0]$ do substrato de GaAs, e ao longo da direção magneticamente difícil, correspondendo a direção $[001]$ do substrato de GaAs. Os resultados da Fig. 4.9(b) foram arrastados para ajustar as simulações com os dados experimentais. Novamente, o campo coercivo para a magnetização para o eixo fácil é mais de uma ordem de grandeza maior que o seu valor experimental. No entanto, o MnAs/GaAs(111) apresenta uma complexa configuração de domínios [66]. A complexa estrutura de domínios, bem como, a possível presença de centros de ancoramento de paredes de domínio magnética tornam razoável arrastar os ciclos de histerese para ajustar com os dados experimentais. Para mostrar de uma maneira simples a influência das anisotropias devidas a deformação da rede cristalina, derivamos uma expressão para o campo de anisotropia, denominado de H_K , quando o campo magnético é aplicado ao longo da direção magneticamente difícil, a qual tem a simples forma:

$$H_K = 2 [K_1 + 2\pi M_s^2 - \epsilon_1(B_1 + 2B_3) - \epsilon_3 B_2] / M_s. \quad (4.3)$$

Na Eq. 4.3 mostramos uma expressão analítica deduzida do modelo para o campo de anisotropia H_K . Os resultados das simulações mostram que o termo magnetoelástico e sua deformação biaxial competem com K_1 (veja equação 4.3 abaixo), favorecendo uma anisotropia fora do plano, reduzindo o campo de anisotropia, H_K . Isto explica o baixo valor encontrado por J. Lindner e colaboradores [65] para a anisotropia magnetocristalina K_1 , uma vez que eles não levaram em conta a contribuição da anisotropia magnetoelástica.

A inclusão da anisotropia magnetoelástica leva a uma contribuição energética que pode fortemente influenciar a rotação da magnetização que tenta acompanhar o campo magnético aplicado.

A equação 4.3 pode ser facilmente interpretada. As anisotropias magnetocristalina e desmagnetizante puxam a magnetização para o plano do MnAs, aumentando o campo necessário para saturar a magnetização ao longo de tal direção, mas a anisotropia magnetoelástica [a influência da anisotropia magnetoelástica é levada em conta pelo termo $\epsilon_1(B_1 + 2B_3)$] compete a favor ou contra elas, aumentando ou diminuindo o campo necessário para saturar a magnetização de tal direção, dependendo do sinal e da intensidade dos acoplamentos magnetoelásticos e deformações da rede.

Nossos resultados fortemente suportam que a anisotropia magnetoelástica força a magnetização para fora do plano do MnAs, diminuindo o campo de saturação, H_K . Veremos a seguir que isso confere-lhe um papel crucial para descrever o comportamento magnético de epicamadas de MnAs.

Se nenhuma contribuição magnetoelástica é considerada para o MnAs/GaAs(111), a constante de anisotropia magnetocristalina de primeira ordem, K_1 , é admitida como sendo 2.9×10^5 J/m³. Este valor é consideravelmente menor que o valor para filme massivo, que é de 7.6×10^5 J/m³. Usando o modelo SW generalizado com os parâmetros das tabelas 4.1, 4.2, 4.3, o campo de saturação para o eixo magneticamente difícil é estimado como sendo 3.5 T. No entanto, o valor experimental de tal quantidade é cerca de 0.6 T. Além disto, se a influência do campo desmagnetizante é levada em conta nos ciclos de histerese, um grande efeito de sobrearrastamento (“overskewing”) é observado [28, 29]. Resolvemos tais peculiaridades levando em conta fontes realísticas de anisotropia magnética, a saber anisotropia magnetoelástica e magnetostrictiva, com acoplamentos magnetoelásticos consistentes com dados experimentais.

Os valores da constante magnetocristalina de segunda ordem, K_2 , estão em bom acordo com resultados publicados anteriormente [15, 62]. Em um trabalho anterior, a dependência de K_1 e K_2 com a temperatura foi investigada [67]. A temperatura ambiente, o termo devido a distorção ortorrômbica é $K_2^o = 0.7 \times 10^5$ J/m³, este termo foi usado para

ajustar o eixo fácil e o eixo intermediário (mostrado na Fig. 4.8) do MnAs/GaAs(001) a temperatura ambiente. O campo necessário para saturar a magnetização ao longo da direção fora do plano é cerca de 1 T.

Um outro resultado interessante do nosso modelo é que ele provê uma explicação para o incomum aumento da anisotropia magnetocristalina de segunda ordem K_2 com o aumento da temperatura. Mesmo se a anisotropia magnetocristalina diminui com o aumento da temperatura, a contribuição de segunda ordem da tensão não precisa seguir o mesmo comportamento. De fato, o campo induzido por tensão torna-se apreciável na coexistência de fases, mas como um efeito de segunda ordem ele só tem uma contribuição não negligenciável em segunda ordem. Assim, K_2 não precisa diminuir ou desaparecer com o aumento de temperatura. Então, tais valores incomuns são devidos a efeitos de tensão de segunda ordem.

Os resultados também são consistentes com imagens de microscopia de força atômica (MFM) feitas no sistema MnAs/GaAs(001), o qual sofre uma transição de domínios na coexistência de fases. No início da transição de fase a magnetização está ao longo da direção $[1\bar{1}0]$. Quando a temperatura aumenta, o sistema sofre uma transição de fase para uma configuração de domínios ao longo do eixo de crescimento, o qual é dividido em três tipos de domínios [16, 68]. Isto é consistente com o nosso modelo, pois à medida que a temperatura aumenta a anisotropia magnetocristalina diminui e anula-se, mas, ao contrário, a anisotropia magnetoelástica ainda está no filme mesmo acima da temperatura de Curie. Ela anula-se somente a uma temperatura maior.

As constantes de acoplamento magnetoelástico durante a coexistência de fases são parâmetros que utilizamos para simular consistentemente o comportamento magnético de epicamadas de MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111). Próximo ao início da transição de fase, a tensão necessária para rotacionar a magnetização do eixo fácil para o eixo intermediário ou magneticamente difícil de magnetização é pequena e positiva. Em tal caso, um valor negativo para B_1 foi encontrado [33, 35]. Durante a coexistência de fases, experimentos de magnetometria de haste oscilante (CBM) mostram que uma tensão negativa é induzida para rotacionar a magnetização do eixo fácil para o eixo intermediário ou difícil. Tal mudança de sinal da tensão induzida indica que há uma mudança de sinal da constante de acoplamento magnetoelástico B_1 , ou seja, durante a coexistência de fases esperamos encontrar um valor positivo para B_1 . De fato, a tabela 4.2 mostra que B_1 é positivo em nossas simulações.

Para verificar se as constantes de acoplamento magnetoelástico da tabela 4.2 são plausíveis, consideramos os valores encontrados para filme massivo das constantes elásticas do MnAs [69], as constantes magnetoelásticas da tabela 4.2, e fazemos uma comparação com os dados experimentais de Yamaguchi e colaboradores [34]. Foram usados $c_{11} = 49$ GPa e $c_{11} = 12$ GPa e foi obtido um bom acordo entre a tensão induzida e o previsto teoricamente. Teoricamente, temos $\sigma_c - \sigma_a \approx -50$ MPa a 300 K e $\sigma_c - \sigma_a \approx -33$ MPa

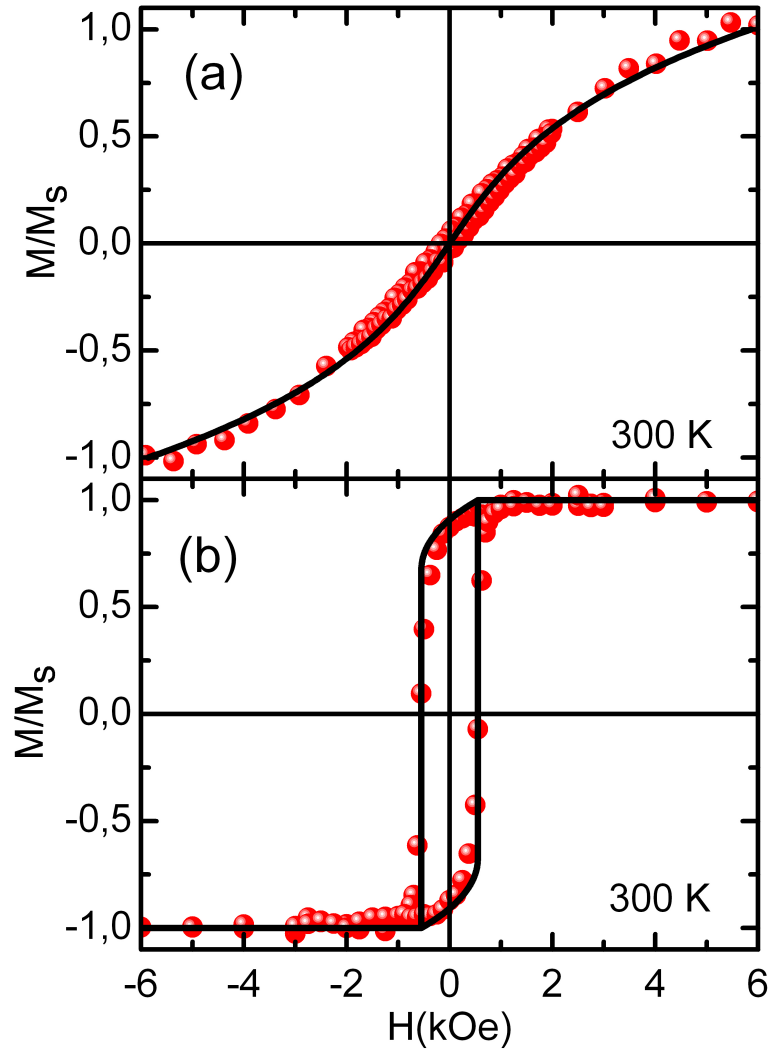


Figura 4.9: Ciclos de histerese obtidos para epicamadas de MnAs/GaAs(111) a 300 K com o campo magnético aplicado no eixo magneticamente (a) difícil e (b) fácil. Círculos vermelhos são dados experimentais e as linhas cheias são os resultados das simulações.

a 310 K. Os valores experimentais a campo de saturação de 1.9 T são de $\sigma_c - \sigma_a \approx -50$ MPa a 300 K e $\sigma_c - \sigma_a \approx -60$ MPa a 310 K. Para o eixo intermediário de magnetização é obtido $\sigma_b - \sigma_a \approx -210$ MPa a 300 K e $\sigma_b - \sigma_a \approx -170$ MPa a 310 K, enquanto que o valor experimental a campos de saturação de 1.0 T dão $\sigma_b - \sigma_a \approx -30$ MPa a 300 K e $\sigma_b - \sigma_a \approx -60$ MPa a 310 K. A discrepância observada entre o valor da tensão induzida prevista teoricamente e o experimental pode ser explicada, uma vez que há uma contribuição não desprezível da componente fora do plano e da fase β do MnAs.

Anteriormente foi relatada a existência de uma componente da magnetização fora do plano no sistema MnAs/GaAs(001) [8]. Esta componente de magnetização fora do

plano anula-se a uma temperatura 10 K mais alta que a componente de magnetização no plano, ou seja, a 333 K. À medida que a temperatura aproxima-se da temperatura de Curie, a componente da magnetização fora do plano relativamente aumenta e ultrapassa a componente no plano [8].

Notavelmente, efeitos de tensão induzida por campo magnético acabam a uma temperatura mais alta que a magnetização no plano se anula, mas na mesma temperatura que a magnetização fora do plano se anula. De acordo com Ney et al. [8], a componente de magnetização fora do plano torna-se comparável à componente de magnetização no plano a 310 K. Para verificar este ponto, nós comparamos a energia para alinhar uma componente de magnetização fora do plano, a qual é proporcional a $B_1(\epsilon_1 - \epsilon_2) + (N_{in} - N_{out})M_s^2/2$, com a energia necessária para alinhar uma componente no plano, a qual é proporcional a $K_1 - B_1\epsilon_1 - B_2\epsilon_3 - B_3(\epsilon_1 + \epsilon_2) - N_{in}M_s^2/2$. A razão para as componentes de magnetização dá um quociente de 0.3 a 310 K, enquanto que o valor experimental deste quociente é de aproximadamente 1/3 a 310 K [8]. Assim, o previsto teoricamente e o medido experimentalmente estão em bom acordo. A temperaturas mais altas que a temperatura de Curie da componente de magnetização no plano, a componente de magnetização fora do plano ainda está presente. Manago et al. [70] sugeriram que a fraca anisotropia fora do plano do MnAs/GaAs(001) é induzida por deformação da rede cristalina. Como efeitos de tensão induzida por campo estão presentes no filme para uma ampla faixa de temperatura, anulando-se a mesma temperatura que a componente fora do plano, e eles podem induzir magnetização fora do plano, propomos que a origem da componente fora do plano como sendo devida a efeitos de tensão no filme. Filmes finos com fraca anisotropia fora do plano, estrutura de domínios tipo “stripe” e componente de magnetização fora do plano foram relatados por Ciria et al. [71].

Cabe salientar que uma instabilidade da estrutura de domínios é observada no caso de epicamadas de MnAs/GaAs(001) crescidas entre 488 e 563 K [57]. As epicamadas que descrevemos aqui foram crescidas em temperaturas maiores, exibindo superfícies mais planas com grandes terraços onde predomina uma estrutura de domínios magnéticos α/β com um padrão de tabuleiro de xadrez.

Outro fato importante é que o MnAs massivo integralmente na fase β a temperaturas mais altas que a de Curie pode ser revertido em um estado ferromagnético aplicando campo magnético externo. Tal efeito foi explicado como transformação de fase induzida por campo magnético [11]. Constante de acoplamentos magnetoelásticos gigantes durante a coexistência de fases acompanhando a transformação inversa β -MnAs para α -MnAs é bem conhecida [10, 11]. Yamaguchi e colaboradores [34] atribuíram inteiramente efeitos de tensão induzida por campo durante a transição de fase a transformação inversa β -MnAs para α -MnAs. Assim, os trabalhos acima mencionados suportam um enorme aumento dos acoplamentos magnetoelásticos durante a coexistência de fases.

O efeito da deformação da rede cristalina nas propriedades estruturais do MnAs foi

tema de trabalhos anteriores [15, 17]. Recentemente, foi proposta uma complexa relação entre a deformação da rede e as propriedades magnéticas nos filmes de MnAs e uma forte dependência de K_1 , K_2 e T_c no ângulo e fração da componente fora do plano [15, 18] foi estabelecida. No entanto, neste trabalho exploramos a influência da deformação da rede como uma fonte de anisotropia magnética.

4.6 Comparação entre as energias de anisotropia

Nesta seção comparamos os valores do módulo das energias anisotrópicas atuantes nas epicamadas de MnAs antes da transição de fase e durante a transição de fase magnetoestrutural.

A tabela 4.4 mostra o valor das anisotropias magnéticas ao longo do eixo difícil no caso de epicamadas de MnAs/GaAs(111)B. Conforme podemos ver nesta tabela, antes do início da transição de fase (no caso a 270 K) a contribuição da energia magnetoelástica para a anisotropia do sistema é negligenciável perante as outras. Neste caso, a energia magnetocristalina é a mais forte. A energia Zeeman para alinhar a magnetização ao longo de tal eixo é grande, mostrando que a saturação ocorre a grandes campos. No entanto, durante a transição de fase magnetoestrutural, conforme mostrado a 310 K o papel das contribuições energéticas à anisotropia mudam. Nesta temperatura, a influência da anisotropia magnetoelástica torna-se relevante, sendo a mais forte entre elas. Mas atribuímos tal enorme aumento da contribuição magnetoelástica à resposta magnetoelástica gigante que as epicamadas de MnAs exibem durante a transição de fase. No caso de epicamadas de MnAs/GaAs(001)B a deformação biaxial faz com que a influência magnetoelástica seja extremamente forte. O valor da interação Zeeman diminui devido a uma abrupta diminuição do campo de saturação.

Tabela 4.4: Comparação entre as energias relevantes ao sistema antes e durante a transição de fase magnetoestrutural. Os valores da interação Zeeman E_{zee} na saturação, das constantes de anisotropia magnetocristalina de primeira ordem K_1 e K_2 , da energia desmagnetizante E_{deg} e da energia magnetoelástica E_{magel} são mostrados para o MnAs/GaAs(111)B para o seu eixo de difícil magnetização para duas temperaturas.

T(K)	E_{zee} ($\times 10^5$ J/m ³)	K_1 ($\times 10^5$ J/m ³)	K_2 ($\times 10^5$ J/m ³)	E_{deg} ($\times 10^5$ J/m ³)	E_{magel} ($\times 10^5$ J/m ³)
270	18	9.0	0.4	3.0	0.85
310	1.8	5.5	0.9	0.45	5.56

A tabela 4.5 mostra o valor das anisotropias magnéticas ao longo do eixo difícil no caso de epicamadas de MnAs/GaAs(001). Neste caso, a anisotropia magnetoelástica é fraca antes e durante o início da transição de fase magnetoestrutural, sendo a anisotropia magnetocristalina a mais forte. Neste caso a energia Zeeman é forte e é sempre a mais forte.

Tabela 4.5: Comparação entre as energias relevantes ao sistema antes e durante a transição de fase magnetoestrutural. Os valores da interação Zeeman E_{zee} na saturação, das constantes de anisotropia magnetocristalina de primeira ordem K_1 e K_2 , da energia desmagnetizante E_{deg} e da energia magnetoelástica E_{magel} são mostrados para o MnAs/GaAs(001) para o seu eixo de difícil magnetização para duas temperaturas.

T(K)	E_{zee} ($\times 10^5$ J/m ³)	K_1 ($\times 10^5$ J/m ³)	K_2 ($\times 10^5$ J/m ³)	E_{deg} ($\times 10^5$ J/m ³)	E_{magel} ($\times 10^5$ J/m ³)
270	14.4	9.0	0.4	3.0	0.76
310	6.0	5.5	0.9	0.45	0.69

A tabela 4.6 mostra o valor das anisotropias magnéticas ao longo do eixo intermediário de magnetização no caso de epicamadas de MnAs/GaAs(001). Neste caso a influência da anisotropia magnetoelástica é desprezível a temperaturas menores do que o início da transição de fase, e tal anisotropia torna-se comparável à anisotropia magnetocristalina para temperaturas dentro da transição de fase magnetoestrutural. Neste caso, a anisotropia magnetocristalina é a mais forte e a energia Zeeman está em segundo lugar.

Tabela 4.6: Comparação entre as energias relevantes ao sistema antes e durante a transição de fase magnetoestrutural. Os valores da interação Zeeman E_{zee} na saturação, das constantes de anisotropia magnetocristalina de primeira ordem K_1 e K_2 , da energia desmagnetizante E_{deg} e da energia magnetoelástica E_{magel} são mostrados para o MnAs/GaAs(001) para o seu eixo intermediário de magnetização para duas temperaturas.

T(K)	E_{zee} ($\times 10^5$ J/m ³)	K_1 ($\times 10^5$ J/m ³)	K_2 ($\times 10^5$ J/m ³)	E_{deg} ($\times 10^5$ J/m ³)	E_{magel} ($\times 10^5$ J/m ³)
270	7.7	9.0	0.4	3.0	0.42
310	3.0	5.5	0.9	0.45	2.7

4.7 Sucesso da modelagem

Como resultado das nossas modelagens, conseguimos uma boa descrição de ambas as epicamadas para uma ampla faixa de temperatura durante e antes do início da transição de fase magnetoestrutural (270K – 310K).

As nossas simulações mostram que o sistema MnAs durante a coexistência de fases exibe uma resposta magnetoelástica gigante, sendo que seus acoplamentos magnetoelásticos aumentam mais de uma ordem de grandeza durante a coexistência de fases α e β . Isto está de acordo com o que foi relatado por outros grupos de pesquisa [11].

O presente trabalho é consistente com uma componente de magnetização fora do plano induzida por efeitos de tensão. O que ocorre é o seguinte; durante a coexistência de fases os efeitos de tensão tornam-se apreciáveis e conforme Yamaguchi e colaboradores [34] eles se estendem por uma ampla faixa de temperatura, anulando-se somente a 333 K.

O efeito da tensão durante a coexistência de fases foi mostrado por nós como sendo crucial para descrever o comportamento histerético de ambas as epicamadas de MnAs. Também mostramos que tais efeitos suportam uma componente de magnetização fora do plano a 310 K. Nós estendemos tal contribuição de efeitos de tensão sobre a componente fora do plano e atribuímos a existência dela para temperaturas acima e durante a coexistência de fases a efeitos de tensão no filme. Isto é razoável, pois além de tudo, curiosamente, os efeitos de tensão anulam-se à mesma temperatura que a componente de magnetização fora do plano.

A partir dos acoplamentos magnetoelásticos obtidos da nossa modelagem também foi possível fazer uma estimativa para a tensão induzida por campo magnético aplicado ao longo de uma certa direção cristalográfica. O confronto entre predição teórica e resultado experimental foi razoável para o eixo de magnetização intermediário e ótimo para o eixo de difícil magnetização.

O baixo campo de saturação medido para epicamadas de MnAs/GaAs(111)B (ou o baixo valor da constante de anisotropia K_1 , conforme medido por Lindner e colaboradores [65]) também foi explicado.

4.8 Possíveis melhorias no modelo

No modelo acima discutido utilizamos várias aproximações. Por exemplo, assumimos que as interações entre domínios magnéticos são desprezíveis. Isto significa que poderíamos utilizar uma formulação micromagnética para a energia livre magnética utilizando constantes de acoplamento de troca. Além disto, vários detalhes das configurações micromagnéticas das epicamadas de MnAs não foram levados em conta.

De modo a obter um acordo ainda melhor entre os resultados das simulações e os dados experimentais poderíamos em um trabalho futuro implementar um modelo tipo Preisach [72], levando em conta a presença de domínios magnéticos e a interação entre eles. Para podermos descrever adequadamente os valores dos campos coercivos é necessário levar em conta o acoplamento inter- e intra- “stripes”. Tal inclusão pode ser baseada no trabalho de R. Engel-Herbert et al [73]. Além disto, podemos analisar o efeito da inclusão de anisotropias magnetoelásticas nos domínios magnéticos e nas propriedades magnetoestruturais de epicamadas de MnAs.

Poderíamos igualmente estudar a repercussão da inclusão da anisotropia magnetoelástica na transição de fase magnetoestrutural α -MnAs para β -MnAs, analisando o seu impacto nas propriedades magnetoestruturais de ambas as fases do MnAs. Por exemplo, poderíamos estudar o impacto na susceptibilidade magnética, nas curvas de efeito magnetocalórico, na coexistência e formação das fases α e β , na indução da componente α -MnAs a partir de um β -MnAs e no momento magnético do MnAs.

Conclusões

Estudamos em detalhes as propriedades macromagnéticas de epicamadas de MnAs, explicando o comportamento peculiar dos ciclos de histerese magnética para uma ampla faixa de temperatura ao redor da transição magnetoestrutural. Discutimos as principais fontes de anisotropia magnética. Valores diferentes para a constante de anisotropia magnetocristalina K_1 são encontradas na literatura. Resolvemos tal problema assumindo a presença de anisotropia magnética devida a tensão e descrevemos consistentemente o comportamento magnético de epicamadas de MnAs por meio de simulações baseadas na generalização do modelo de Stoner-Wohlfarth.

Constantes de acoplamento magnetoelástica perto do início da transição de fase foram obtidas por outros grupos [33, 35]. Elas foram determinadas experimentalmente resultando em valores desprezíveis em temperaturas abaixo da coexistência de fases. No entanto, o estudo apresentado sugere que há um enorme aumento das constantes magnetoelásticas durante a coexistência de fases. De fato, experimentalmente foi detectada uma resposta magnetoelástica gigante em temperaturas acima do início da transição de fase [10, 11].

Os valores que obtivemos a partir de nossas simulações dos ciclos de histerese são mostrados nas Tabelas I, II e III da seção 4.3 . Em especial, obtivemos a temperatura ambiente (300 K): $K_1 = 7.6 \times 10^5 \text{ J/m}^3$, $K_2 = 0.6 \times 10^5 \text{ J/m}^3$, $B_1 = 167.0 \times \text{MJ/m}^3$, $B_2 = -88.6 \times \text{MJ/m}^3$, $B_3 = -156.0 \times \text{MJ/m}^3$.

Este valores estão em muito bom acordo com resultados experimentais conhecidos para o MnAs em volume e também para os resultados experimentais observados em filmes de MnAs.

Um pequeno número de parâmetros foram deixados livres (B_1 , B_2 , B_3 e K_2) em nossas simulações. Um excelente acordo é observado entre nossas simulações e os resultados experimentais em várias temperaturas e orientações de aplicação do campo magnético relativo aos eixos cristalográficos das epicamadas de MnAs.

Em concordância com experimentos e trabalhos anteriores nós mostramos que as interações magnetoelásticas tem um papel crucial para explicar o comportamento magnético de epicamadas de MnAs, simulando a histerese magnética de ambas as epicamadas MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111). Em particular, mostramos que a componente de magnetização fora do plano do MnAs/GaAs(001) pode ser explicada como sendo devida a efeitos de tensão em temperaturas na coexistência de fase e acima dela.

Em suma, consideramos ter obtido uma boa descrição do processo de magnetização de filmes monocristalinos de MnAs diretamente integrados a substratos de GaAs.

Nossa descrição é consistente com as propriedades do MnAs massivo e condizente com as observações experimentais de vários grupos de pesquisa. Os efeitos dos campos de tensão decorrentes da epitaxia desaparecem rapidamente quando a espessura dos filmes ultrapassa algumas monocamadas atômicas. No entanto, os campos de tensão mecânica decorrentes da diferença dos coeficientes de dilatação térmica do GaAs e do MnAs são persistentes e predominantes ao redor da temperatura ambiente. Esses campos de tensão dependem do processo térmico de preparação das amostras. A tensão mecânica induzida pela ação de campos magnéticos externos e efeitos magnetostrictivos adicionam a tensão residual dos filmes, ora amplificando e ora reduzindo as deformações na estrutura cristalina. A formação de padrões de domínios magnéticos em um intervalo de temperatura de coexistência de fases ferromagnética e paramagnética reflete em grande parte a ação dos acoplamentos magnetoelásticos.

Em consequência, a resposta magnetoelástica nas epicamadas de MnAs/GaAs ganha uma importância crucial na descrição do processo de magnetização.

O sucesso da modelagem utilizada é decorrente de admitir a importância das constantes de magneto-acoplamento e deixá-las como parâmetros livres para a minimização da energia livre magnética, independentemente do tipo de campo de tensionamento residual presente nas amostras.

Contribuição da deformação da rede cristalina para a anisotropia magnética

A.1 Introdução

Efeitos elásticos e magnetoelásticos são responsáveis por muitas propriedades interessantes em diversas nanoestruturas. Alguns exemplos interessantes são:

- domínios intrínsecos, exibindo diversas configurações de domínios magnéticos, tais como as estruturas tipo listras [48];
- componente de magnetização fora do plano induzida por efeitos de tensão [8, 71];
- efeito magnetocalórico gigante [4, 5];
- conversão de fases induzida por aplicação de campo magnético [11, 34];
- distanciamentos atômicos gigantes (em torno de 1 pm) na temperatura de Néel de sistemas multiferróicos, como as manganitas hexagonais [74–76].

Materiais ferromagnéticos são intrinsicamente magnetostrictivos, desenvolvendo um mecanismo de deformação quando submetidos a um campo magnético externo. Este fenômeno vem da rotação de domínios ferromagnéticos em um material exposto a um campo magnético, acarretando um campo de deformação interno. Em uma dada estrutura, os átomos estão em uma configuração de equilíbrio. A energia elástica é responsável por um equilíbrio estável das posições atômicas e a magnetização tem uma direção preferencial. Mudanças induzidas magneticamente na elasticidade e na contribuição magnetoelástica para a anisotropia magnetocristalina em filmes finos podem diferir substancialmente das respectivas propriedades de filme massivo [77]. Tanto a magnitude como o

sinal das constantes de acoplamento magnetoelásticas podem diferir dos respectivos valores massivos no caso de filmes ultrafinos e filmes ferromagnéticos sob deformação. A magnetização pode ser influenciada pela deformação da rede. Em primeira ordem as origens dos efeitos magnetoelásticos são bem conhecidas para diversas estruturas cristalinas [30, 78]. Por esta razão, as constantes elásticas, acoplamento magnetoelásticas e deformações são parâmetros para modelar a influência da tensão no processo de magnetização.

Por exemplo, simulações micromagnéticas são efetuadas usando termos magnetoelásticos em primeira e segunda ordem [78–85]. Contudo, termos não lineares são necessários para descrever corretamente o comportamento magnético de filmes finos e suas origens ainda não foram bem entendidas [21, 23, 25, 30, 79]. A modificação do acoplamento magnetoelástico pode ser vista como uma força alternativa no desvio do eixo fácil de magnetização em filmes em relação ao filme massivo.

Mason [22] deduziu uma complexa correção da influência das deformações para a anisotropia magnética. Buscando uma maneira simples para estudar o papel da deformação como uma fonte secundária de anisotropia, nós aplicamos a minimização da densidade de energia livre e usualmente analisamos a anisotropia induzida. Assim, nós obtemos expressões analíticas para as mudanças na energia de anisotropia para constantes de anisotropia de primeira e de segunda ordem devidas a deformação de rede induzida por campo magnético. Tais contribuições, expressas em termos de valores válidos para filmes massivos das constantes elásticas e magnetoelásticas, correspondem a mudanças efetivas nos valores do valor das constantes de anisotropia magnetocristalina em primeira e segunda ordem.

Nossos resultados foram aplicados para alguns materiais ferromagnéticos e nanoestruturas bem conhecidos, os quais têm estruturas cúbicas e hexagonais. Nós demonstramos que as contribuições magnetoelásticas para as constantes de anisotropia em primeira e segunda ordem não podem ser negligenciadas em muitos casos.

Nossos resultados permitem a determinação da efetiva contribuição magnetoelástica para a anisotropia magnética em um sistema nanoestruturado. Eles também permitem identificar possíveis discrepâncias nas medidas das constantes de anisotropia que podem ser erroneamente atribuídas a efeitos de dimensionalidade e deformação residual presente na amostra. Nós consideramos como exemplos de mudanças na energia de anisotropia os casos de *Co* e *MnAs*, os quais têm estrutura hexagonal com anisotropia magnética forte. Como exemplos de redes cúbicas consideramos o *Ni* cúbico com face centrada e *Fe* cúbico com corpo centrado, ambos tendo constantes de anisotropia pequenas. Para verificar as mudanças de anisotropia em um sistema com forte acoplamento magnetoelástico, nós levamos em conta resultados conhecidos para ligas de $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$ (galfenol). A origem de suas propriedades magnetoelásticas incomuns é a transformação cúbica para tetragonal, a qual ocorre em concentrações ao redor de $x = 26\%$.

Apresentamos esses resultados nesse Apêndice pois entendemos que eles contribuem para compressão e reforçam a fundamentação física de nossas simulações das magnetizações das epicamadas de MnAs.

A.2 Sistema hexagonal

No que se segue, nós discutimos as contribuições para a anisotropia magnética devido à deformação da rede para um sistema com simetria hexagonal. São explicitamente dadas as contribuições de distorção quando o sistema está sobre um estado de deformação geral e quando está sobre um estado de deformação biaxial.

A.2.1 Estado de deformação geral

Primeiramente nós derivamos as contribuições de deformação da rede para o caso de “deformação geral”, ou seja, quando as variáveis ϵ_i são independentes. Nós derivamos as respectivas equações de mínimo para as deformações e as correspondentes anisotropias induzidas devido a mudança das posições de equilíbrio da célula unitária devido a aplicação de campo magnético externo.

A.2.1.1 Equações de mínimo

Nós aplicamos a minimização da energia elástica total (Eqs. 2.12 e 2.13) com respeito às deformações ϵ_i , $i = 1, 2, \dots, 6$, e encontramos as deformações que minimizam a energia magnética total. Elas são dadas por:

$$\epsilon_1 = \frac{B_1(c_{13}^2 - c_{11}c_{33})\alpha_1^2 + B_1(-c_{13}^2 + c_{12}c_{33})\alpha_2^2}{(c_{11} - c_{12})[-2c_{13}^2 + c_{33}(c_{11} + c_{12})]} + \frac{(B_3c_{33} - B_2c_{13})\alpha_3^2}{[-2c_{13}^2 + c_{33}(c_{11} + c_{12})]}, \quad (\text{A.1})$$

$$\epsilon_2 = \frac{B_1(-c_{13}^2 + c_{12}c_{33})\alpha_1^2 + B_1(c_{13}^2 - c_{11}c_{33})\alpha_2^2}{(c_{11} - c_{12})[-2c_{13}^2 + c_{33}(c_{11} + c_{12})]} + \frac{(B_3c_{33} - B_2c_{13})\alpha_3^2}{[-2c_{13}^2 + c_{33}(c_{11} + c_{12})]}, \quad (\text{A.2})$$

$$\epsilon_3 = \frac{B_1c_{13} + [-(B_1 + 2B_3)c_{13} + B_2(c_{11} + c_{12})]\alpha_3^2}{[-2c_{13}^2 + c_{33}(c_{11} + c_{12})]}, \quad (\text{A.3})$$

$$\epsilon_4 = -\left(\frac{B_4\alpha_2\alpha_3}{c_{44}}\right), \quad (\text{A.4})$$

$$\epsilon_5 = - \left(\frac{B_4 \alpha_1 \alpha_3}{c_{44}} \right), \quad (\text{A.5})$$

$$\epsilon_6 = \frac{-2B_1 \alpha_1 \alpha_2}{(c_{11} - c_{12})}. \quad (\text{A.6})$$

É importante ressaltar que as equações de mínimo acima diferem drasticamente das obtidas em um trabalho anterior [86]. Neste trabalho anterior uma densidade de energia livre diferente foi usada. West [86] incluiu na equação 2.13 um termo dependendo de ϵ_1, ϵ_2 e ϵ_3 para levar em conta a energia do estado desmagnetizado. No caso estudado, no estado desmagnetizado a magnetização aponta ao longo da direção c do hexágono. No entanto, tal inclusão não é válida, uma vez que a expressão original não contém tais termos [33] e esta dependência adicional das deformações muda a contribuição da energia que é devida a deformação da célula unitária, dando expressões erradas para as equações de mínimo da deformação.

A.2.1.2 Anisotropia magnética induzida

Aplicando um campo magnético externo uma deformação pode ser induzida no material. Mudando o módulo do campo, as posições de equilíbrio das posições atomísticas nas células unitárias são alteradas, e devida a esta deformação há uma mudança nas energias elásticas e magnetoelásticas. Consequentemente, uma anisotropia magnética é induzida, denominada anisotropia de deformação de rede induzida por campo magnético externo.

Esta deformação tem uma influência na anisotropia, levando a um termo adicional na densidade de energia livre total, denotado usualmente por ΔK , em primeira e segunda ordem do cosseno diretor α_3 :

$$\Delta K = K_1^S \alpha_3^2 + K_2^S \alpha_3^4, \quad (\text{A.7})$$

aqui $\alpha_3 = \cos \theta$ e o super-índice “S” designa que K_1^S e K_2^S são devidos a efeitos de deformação de rede induzidos por campo magnético externo.

Matematicamente, inserimos as expressões obtidas para as deformações de equilíbrio (equações A.1, A.2, A.3, A.4, A.5, A.6) na densidade de energia livre total e subtraímos a energia do estado sem deformação. Como resultados obtemos que os coeficientes K_1^S and K_2^S são dados por:

$$K_1^S = \frac{-B_1 c_{13} [B_2 (c_{11} - c_{12}) + B_1 c_{13}]}{(c_{11} - c_{12}) [-2 c_{13}^2 + (c_{11} + c_{12}) c_{33}]} + \frac{B_1 [(B_1 + B_3) c_{11} - B_3 c_{12}] c_{33}}{(c_{11} - c_{12}) [-2 c_{13}^2 + (c_{11} + c_{12}) c_{33}]} - \frac{B_4^2}{2 c_{44}}, \quad (\text{A.8})$$

$$K_2^S = \frac{B_2^2 (c_{11} + c_{12}) + 2 B_2 (B_1 + 2 B_3) c_{13}}{2 [-2 c_{13}^2 + (c_{11} + c_{12}) c_{33}]} + \frac{B_1^2 c_{13}^2 - (B_1 + B_3)^2 c_{11} c_{33}}{2 (c_{11} - c_{12}) [-2 c_{13}^2 + (c_{11} + c_{12}) c_{33}]} - \frac{2 B_3 (B_1 + B_3) c_{12} c_{33}}{2 (c_{11} - c_{12}) [-2 c_{13}^2 + (c_{11} + c_{12}) c_{33}]} + \frac{B_4^2}{2 c_{44}}. \quad (\text{A.9})$$

As equações acima dizem que se nós temos os valores das constantes de acoplamento magnetoelásticos, B_i , e o valor dos acoplamentos elásticos c_{ij} , nós somos capazes de avaliar o efeito de deformação da célula unitária na anisotropia magnética.

A.2.2 Deformação biaxial

Um caso interessante é o caso de deformação biaxial. Isto significa que nem todas as deformações ϵ_i são independentes, mas $\epsilon_1 = \epsilon_2$. As equações de mínimo derivadas das equações 2.12 e 2.13 para o caso de deformação geral não são válidas somente pondo $\epsilon_1 = \epsilon_2$ mas nós temos que colocar de antemão as condições de deformação biaxial nas energias livres 2.12 e 2.13. Assim, a energia elástica, F_{el}^{BS} , tem a seguinte forma:

$$F_{el}^{BS} = (c_{11} + c_{12}) \epsilon_1^2 + 2 c_{12} \epsilon_3 \epsilon_1 + \frac{1}{2} c_{33} \epsilon_3^2 + \frac{1}{2} c_{44} (\epsilon_4^2 + \epsilon_5^2) + \frac{1}{4} (c_{11} - c_{12}) \epsilon_6^2, \quad (\text{A.10})$$

e a energia magnetoelástica, F_{ME}^{BS} , tem a seguinte forma:

$$F_{ME}^{BS} = B_1 (-\alpha_3^2 \epsilon_1 + \alpha_1 \alpha_2 \epsilon_6) - B_2 \alpha_3^2 \epsilon_3 - 2 B_3 \alpha_3^2 \epsilon_1 + B_4 (\alpha_2 \alpha_3 \epsilon_4 + \alpha_1 \alpha_3 \epsilon_5). \quad (\text{A.11})$$

Minimizando a energia elástica total, $F_{t,el}^{BS} = F_{el}^{BS} + F_{ME}^{BS}$, somos levados às seguintes relações de mínimos das deformações:

$$\epsilon_1 = \frac{[2 B_2 c_{13} - (B_1 + 2 B_3) c_{33}] \alpha_3^2}{2 [2 c_{13}^2 - (c_{11} + c_{12}) c_{33}]}, \quad (\text{A.12})$$

$$\epsilon_3 = \frac{[c_{13} (B_1 + 2 B_3) - B_2 (c_{11} + c_{12})] \alpha_3^2}{2 [2 c_{13}^2 - (c_{11} + c_{12}) c_{33}]}, \quad (\text{A.13})$$

$$\epsilon_4 = -\frac{B_4 \alpha_2 \alpha_3}{c_{44}}, \quad (\text{A.14})$$

$$\epsilon_5 = -\frac{B_4 \alpha_1 \alpha_3}{c_{44}}, \quad (\text{A.15})$$

$$\epsilon_6 = -\frac{2 B_1 \alpha_1 \alpha_2}{(c_{11} - c_{12})}. \quad (\text{A.16})$$

Inserindo as equações acima na energia elástica total, somos levados a uma anisotropia adicional induzida por deformação com termos em primeira e segunda ordem de α_3 (aqui o super-índice “BS” denota deformação biaxial):

$$K_1^{BS} = -\frac{B_4^2}{2 c_{44}}, \quad (\text{A.17})$$

$$K_2^{BS} = \frac{2 B_2^2 (c_{11} + c_{12}) - 4 B_2 (B_1 + 2 B_3) c_{13}}{4 [c_{13}^2 - 2 (c_{11} + c_{12}) c_{33}]} + \frac{(B_1 + 2 B_3)^2 c_{33}}{4 [c_{13}^2 - 2 (c_{11} + c_{12}) c_{33}]} + \frac{B_4^2}{2 c_{44}} \quad (\text{A.18})$$

aqui K_1^{BS} e K_2^{BS} são as contribuições em primeira e segunda ordem da deformação da rede induzida por campo para a anisotropia magnética. Em contraste ao estado de deformação geral, surpreendentemente, um termo adicional aparece, denotado por K_{add}^{BS} , que é dado por:

$$K_{add}^{BS} = -\frac{B_1^2}{(c_{11} - c_{12})}. \quad (\text{A.19})$$

Esta contribuição para a anisotropia magnética é da forma $K_{add}^{BS} \alpha_1^2 \alpha_2^2$.

A.3 Sistema cúbico

Nesta seção nós discutimos as equações de mínimo das deformações da rede e a anisotropia induzida por deformação da rede no caso de deformação geral e biaxial para sistemas com simetria cúbica.

A.3.1 Deformação geral

Nós analisamos o caso de deformação geral e derivamos as equações que as deformações no equilíbrio obedecem. Em seguida, obtemos as respectivas contribuições para a anisotropia magnética devido ao deslocamento da célula unitária mediante campo magnético aplicado.

A.3.1.1 Equações de mínimo

Minimizando as equações 2.14 e 2.15, as deformações obedecendo as condições de mínimo são dadas por:

$$\epsilon_1 = \frac{B_1 c_{12} - B_1 (c_{11} + 2 c_{12}) \alpha_1^2}{(c_{11} - c_{12}) (c_{11} + 2 c_{12})}, \quad (\text{A.20})$$

$$\epsilon_2 = \frac{B_1 c_{12} - B_1 (c_{11} + 2 c_{12}) \alpha_2^2}{(c_{11} - c_{12}) (c_{11} + 2 c_{12})}, \quad (\text{A.21})$$

$$\epsilon_3 = \frac{B_1 c_{12} - B_1 (c_{11} + 2 c_{12}) \alpha_3^2}{(c_{11} - c_{12}) (c_{11} + 2 c_{12})}, \quad (\text{A.22})$$

$$\epsilon_4 = - \left(\frac{B_2 \alpha_2 \alpha_3}{c_{44}} \right), \quad (\text{A.23})$$

$$\epsilon_5 = - \left(\frac{B_2 \alpha_1 \alpha_3}{c_{44}} \right), \quad (\text{A.24})$$

$$\epsilon_6 = - \left(\frac{B_2 \alpha_1 \alpha_2}{c_{44}} \right). \quad (\text{A.25})$$

As equações de mínimo acima estão em acordo com trabalhos anteriores obtidos por Kittel [30].

A.3.1.2 Anisotropia induzida

De acordo com Kittel [30] a anisotropia devida a deformação da rede induzida por campo para um sistema cúbico, K_c^s , é descrita como um incremento na anisotropia

magnetocristalina, tendo a forma:

$$K_c^s = \frac{9}{4} [(c_{11} - c_{12})\lambda_{100}^2 - 2c_{44}\lambda_{111}^2], \quad (\text{A.26})$$

aqui λ_{100} e λ_{111} são os valores de saturação da magnetostricção nas direções [100] e [111] respectivamente. Elas estão relacionadas aos acoplamentos magnetoelásticos e às constantes elásticas pelas seguintes relações:

$$\lambda_{100} = -\frac{2}{3} \frac{B_1}{c_{11} - c_{12}}, \quad (\text{A.27})$$

$$\lambda_{111} = -\frac{1}{3} \frac{B_2}{c_{44}}. \quad (\text{A.28})$$

Inserindo as relações acima na equação A.26, temos:

$$K_c^s = \frac{B_1^2}{c_{11} - c_{12}} - \frac{1}{2} \frac{B_2^2}{c_{44}}. \quad (\text{A.29})$$

Os termos acima agem como um incremento para a anisotropia magnetocristalina em primeira ordem (veja equação 2.5).

A.3.2 Deformação biaxial

Nesta seção analisamos o caso de deformação biaxial ($\epsilon_1 = \epsilon_2$). As densidades de energia livre elástica e magnetoelástica são escritas, respectivamente, como:

$$F_{el}^c = \frac{1}{2} c_{11} (2\epsilon_1^2 + \epsilon_3^2) + \frac{1}{2} c_{44} (\epsilon_4^2 + \epsilon_5^2 + \epsilon_6^2) + c_{12} (\epsilon_1^2 + 2\epsilon_1\epsilon_3), \quad (\text{A.30})$$

$$F_{ME}^c = B_1 \alpha_3^2 (\epsilon_3 - \epsilon_1) + B_2 (\alpha_1 \alpha_2 \epsilon_6 + \alpha_2 \alpha_3 \epsilon_4 + \alpha_3 \alpha_1 \epsilon_5). \quad (\text{A.31})$$

A.3.2.1 Equações de mínimo

As equações que as deformações no equilíbrio obedecem são dadas por:

$$\epsilon_1 = \frac{B_1 \alpha_3^2}{2 (c_{11} - c_{12})}, \quad (\text{A.32})$$

$$\epsilon_3 = - \left(\frac{B_1 \alpha_3^2}{c_{11} - c_{12}} \right), \quad (\text{A.33})$$

$$\epsilon_4 = - \left(\frac{B_2 \alpha_2 \alpha_3}{c_{44}} \right), \quad (\text{A.34})$$

$$\epsilon_5 = - \left(\frac{B_2 \alpha_1 \alpha_3}{c_{44}} \right), \quad (\text{A.35})$$

$$\epsilon_6 = - \left(\frac{B_2 \alpha_1 \alpha_2}{c_{44}} \right). \quad (\text{A.36})$$

As equações acima diferem fortemente das equações de mínimo obtidas no caso de deformação geral, conforme mostrado na seção A.3.1.

A.3.2.2 Anisotropia induzida

Inserindo as equações de mínimo que as deformações obedecem A.32-A.36 nas equações A.30 e A.31, as contribuições da deformação de rede induzida por campo tem dois termos K_c^{BS} e K_{ac}^{BS} , dadas respectivamente por:

$$K_c^{BS} = \frac{-B_2^2}{2 c_{44}}, \quad (\text{A.37})$$

$$K_{ac}^{BS} = \frac{-3 B_1^2}{4 (c_{11} - c_{12})}, \quad (\text{A.38})$$

aqui K_c^{BS} é uma contribuição esperada, sendo similar a obtida no caso de deformação geral, atuando como um termo de incremento para anisotropia magnetocristalina em primeira ordem de materiais cúbicos (veja Eq. 2.5). Além disto, K_{ac}^{BS} é uma contribuição para a anisotropia magnética que aparece somente no caso de deformação biaxial, cuja contribuição para a anisotropia magnética é da forma $K_{ac}^{BS} \alpha_3^4$.

Na seção que se segue avaliamos e discutimos as correções para a anisotropia magnética para sistemas cúbicos.

A.4 Aplicações

Para avaliar a contribuição da deformação de rede cristalina induzida por campo magnético nas constantes de anisotropia magnetocristalina nós usamos parâmetros de materiais massivos.

A tabela A.1 mostra valores dos acoplamentos magnetoelásticos e das constantes elásticas para alguns materiais magnéticos com simetria hexagonal.

Nós extrapolamos nossos resultados no sentido que aplicamos os valores de materiais massivos em filmes para investigar a influência da deformação da rede induzida por campo magnético para a anisotropia magnética.

Para o MnAs/GaAs(001) imediatamente antes do início da transição de fase, os acoplamentos magnetoelásticos B_i e as constantes elásticas c_{ij} foram determinadas experimentalmente [33, 35]. A contribuição para a anisotropia de deformação de rede induzida por campo é obtida inserindo-os nas equações A.8 e A.9, levando a $K_1^S = 1 \text{ kJ/m}^3$ e $K_2^S = -0.6 \text{ kJ/m}^3$. Se nós compararmos tais termos com as constantes de anisotropia magnetocristalina de primeira e segunda ordem ($K_1 = 7.6 \times 10^5 \text{ J/m}^3$ and $K_2 = 0.6 \times 10^5 \text{ J/m}^3$), obtemos que tais contribuições são negligenciáveis.

Se a resposta magnetoelástica é forte, as contribuições devido a deformação da rede automaticamente tornam-se não negligenciáveis. Este é o caso de epicamadas de MnAs que exibem uma enorme resposta magnetoelástica em algumas temperaturas [11]. Tal resposta magnetoelástica aumenta a influência da anisotropia de deformação de rede induzida por campo. Para avaliarmos numericamente as equações A.8 e A.9 consideramos MnAs/GaAs(001), cuja deformação é diferente ao longo dos eixos cristalográficos [48]. Para avaliar as equações A.17 e A.18 consideramos MnAs/GaAs(111) o qual está submetido a deformação biaxial [14]. Para o MnAs/GaAs(001) as contribuições em primeira e segunda ordem são $K_1^S = 2 \times 10^5 \text{ J/m}^3$ e $K_2^S = -2.9 \times 10^5 \text{ J/m}^3$, respectivamente. Para o MnAs/GaAs(111) a contribuição de segunda ordem é $K_2^{BS} = -1.0 \times 10^5 \text{ J/m}^3$ e a anisotropia adicional induzida, K_{add}^{BS} , é $-7.5 \times 10^5 \text{ J/m}^3$. Como uma consequência, as contribuições para o MnAs são comparáveis a valores relatados das constantes magnetocristalinas em primeira e segunda ordem do MnAs, os quais são $K_1 = 7.6 \times 10^5 \text{ J/m}^3$ e $K_2 = 0.6 \times 10^5 \text{ J/m}^3$ [62].

Os cálculos sugerem que a contribuição da deformação de rede induzida por campo magnético torna-se muito importante se os acoplamentos magnetoelásticos são gigantes e esta fonte adicional de anisotropia deve ser levada em conta para uma descrição realística de sistemas magnéticos hexagonais.

Para o Co hcp as contribuições de deformação em primeira e segunda ordem são $K_1^S = -6.0 \times 10^3 \text{ J/m}^3$ e $K_2^S = 2.0 \times 10^3 \text{ J/m}^3$, respectivamente. A anisotropia mag-

Tabela A.1: Acoplamentos magnetoelásticos B_i [33, 35, 87], constantes elásticas c_{ij} [30, 35, 69, 78], K_1^S e K_2^S são as contribuições da deformação de rede de primeira e segunda ordem, respectivamente, induzida por campo magnético para a anisotropia magnética para alguns materiais magnéticos com estrutura hexagonal.

Element	B_1 (MJ/m ³)	B_2 (MJ/m ³)	B_3 (MJ/m ³)	B_4 (MJ/m ³)	c_{11} (GPa)	c_{12} (GPa)	c_{13} (GPa)	c_{33} (GPa)	c_{44} (GPa)	K_1^S (MJ/m ³)	K_2^S (MJ/m ³)
MnAs	-6.6	0.4	-2.0	1.3	49	12	13.2	114	4.6	0.001	-0.0006
MnAs/GaAs(001)	167.0	-88.6	-156.0	-	49	12	13.2	114	4.6	0.2	-0.29
MnAs/GaAs(111)	167.0	-88.6	-156.0	-	49	12	13.2	114	4.6	-	-0.1
hcp Co	-8.1	-29.0	28.2	29.4	307	165	103	358	75.5	-0.006	0.002

Tabela A.2: Acoplamentos magnetoelásticos B_i [30, 78], constantes elásticas c_{ij} [30, 78], contribuição da deformação de rede induzida por rede em primeira e segunda ordem para a anisotropia magnética para alguns materiais com estrutura cúbica.

Element	B_1 (MJ/m ³)	B_2 (MJ/m ³)	c_{11} (GPa)	c_{12} (GPa)	c_{44} (GPa)	K_c^S (J/m ³)	K_c^{BS} (J/m ³)	K_{ac}^{BS} (J/m ³)
fcc Co	-20.0	1.5	242	160	128	4870	-8.8	-3700
bcc Fe	-3.43	7.83	229	134	115	-142	-266	-92
fcc Ni	9.38	10.0	249	152	118	483	-423	-680

netocristalina do Co em primeira ordem é $K_1 = 5 \times 10^5$ J/m³ [78], mais forte do que contribuição da deformação de rede induzida por campo em primeira ordem $K_1^S = 6 \times 10^3$ J/m³. Todavia, a contribuição da deformação de rede induzida por campo em segunda ordem é mais forte do que a constante de anisotropia magnetocristalina de segunda ordem do Co, a qual vale $K_2 = 1.0 \times 10^3$ J/m³ [78].

Tabela A.3: Constantes de anisotropia magnetocristalina em primeira e segunda ordem K_1^{Ga} e K_2^{Ga} [88, 89], constantes de magnetostricção λ_{100} e λ_{111} [90, 91], acoplamentos magnetoelásticos B_i , constantes elásticas c_{ij} [91, 92] e contribuição em primeira ordem da anisotropia de deformação da rede induzida por campo para a anisotropia magnética para ligas de FeGa.

%Ga	K_1^{Ga} (kJ/m ³)	K_2^{Ga} (kJ/m ³)	$\frac{3}{2}\lambda_{100}$ $\times 10^{-6}$	$\frac{3}{2}\lambda_{111}$ $\times 10^{-6}$	$\frac{c_{11}-c_{12}}{2}$ (GPa)	c_{44} (GPa)	B_1 (MJ/m ³)	B_2 (MJ/m ³)	K_c^S (kJ/m ³)
13	50.0	-110	210	-30	24	120	-10.0	7.2	1.9
15	40.0	-95	260	-23	22	110	-11.0	5.0	2.6
17	32.0	-80	311	-22	20	110	-12.5	4.84	3.8
19	15.0	-70	390	-20	18	110	-14.0	4.4	5.4
21	1.0	11	280	45	10	110	-5.6	-10.0	1.1
24	-1.2	5	310	55	15	110	-9.0	-12.0	2.0
29	-2.0	5	300	55	10	110	-6.0	-12.0	1.1

Para comparação, nós também avaliamos contribuições da deformação da rede cristalina para estruturas cúbicas (veja equações A.29, A.37 e A.38). Para avaliá-las,

nós escolhemos alguns materiais com simetria cúbica como *Fe* bcc, *Co* fcc e *Ni* fcc. As contribuições para um estado de deformação geral, $K_{1,c}^S$, e as contribuições associadas com um estado de deformação biaxial $K_{1,c}^{BS}$ and $K_{a,c}^{BS}$ são mostrados na tabela A.2. Para o *Fe* bcc e *Ni* fcc, as contribuições de deformação da rede cristalina induzida por campo são muito menores do que a constante de anisotropia magnetocristalina de primeira ordem. As contribuições de deformação de rede induzida por campo valem em primeira e segunda ordem 4.8×10^4 J/m³ e -6×10^3 J/m³, respectivamente. Para o *Co* fcc as contribuições K_c^S e K_{ac}^{BS} são uma ordem de magnitude menor do que as constantes de anisotropia magnetocristalina em primeira e segunda ordem, as quais são iguais a -5.7×10^4 J/m³ e 1.3×10^4 J/m³, respectivamente. Logo, para sistemas cúbicos tais contribuições devidas a deformação para a anisotropia magnética são negligenciáveis. Isto pode ser consequência do alto grau de simetria de uma rede cúbica. Além disto, a influência negligenciável de tais contribuições podem ser consequência de pequenas respostas magnetoelásticas para tais materiais cúbicos.

Nós também aplicamos nossos resultados para ligas de FeGa. $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$ ou “galfenol” é um material de interesse em magnetomecânica. As magnetostricções mais elevadas (acima de 400 ppm) em $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$ bcc são devidas a propriedades elásticas peculiares de pares de átomos de Ga ao longo da direção [100] [90].

Nós calculamos a influência da deformação da rede induzida por campo na anisotropia magnética usando parâmetros válidos para materiais massivos mono-domínio. Os resultados são mostrados na Tab. A.3. Para concentrações de Ga menores do que 21%, a anisotropia magnetocristalina é mais forte do que a contribuição devida a deformação da rede. Mas se a concentração é maior do que 21%, a contribuição da deformação de rede induzida por campo para a anisotropia magnética torna-se comparável em magnitude com K_1^{Ga} (anisotropia magnetocristalina de primeira ordem). Então a pequena anisotropia magnética observada para o Ga para $> 21\%$ pode ser devida a efeitos de distorção da rede mediante campo magnético. Para o galfenol exibindo alta magnetostricção tetragonal, os valores das contribuições da anisotropia induzida por distorção da rede induzida por campo pode até exceder valores medidos das contribuições magnetocristalinas determinadas pelos métodos das áreas [88]. Isto significa que as constantes de anisotropia magnetocristalina em primeira e segunda ordem K_1 e K_2 podem ter sido determinadas sem levar em conta contribuições magnetoelásticas e e contribuições para a anisotropia magnética da deformação da rede cristalina mediante campo magnético. Adicionalmente, usando as equações de mínimo para o caso de deformação geral para estruturas cúbicas (Equações. A.20-A.25) para $\text{Fe}_{83}\text{Ga}_{17}$, $\text{Fe}_{81}\text{Ga}_{19}$ e $\text{Fe}_{79}\text{Ga}_{21}$ a deformação induzida devida a aplicação de campo são estimadas respectivamente como tendo os valores 310, 390 e 280 ppm, enquanto que seus valores experimentais na saturação são 240, 250 e 200 ppm respectivamente [90, 93]. Isso mostra que estimativas e medidas experimentais de deformação induzida estão em bom acordo.

A.5 Comentários finais

Materiais hexagonais tem anisotropia magnetocristalina em primeira e segunda ordem, as quais têm dependência em α_3^2 e α_3^4 . Uma vez que a anisotropia magnetocristalina é proporcional a α_3^2 e α_3^4 em primeira e segunda ordem, respectivamente, as contribuições da deformação de rede induzida por campo podem ser consideradas como incrementos à anisotropia magnetocristalina em primeira e segunda ordem.

Nós deduzimos as contribuições da deformação de rede induzida por campo para a anisotropia magnética para os casos de deformação geral e o caso de deformação biaxial. A dedução obtida para o caso de deformação biaxial não é de modo algum um caso particular da derivação para o caso geral somente pondo $\epsilon_1 = \epsilon_2$. Inclusive, um termo extra, cuja dependência é em $\alpha_1^2\alpha_2^2$, surge.

A contribuição adicional é comparável à anisotropia magnetocristalina se as constantes de acoplamento magnetoelásticas aumentam abruptamente. Tal ocorrência foi relatada anteriormente para epicamadas de MnAs/GaAs(001) e MnAs/GaAs(111)B. Tais contribuições para a anisotropia magnética são importantes e não podem ser simplesmente negligenciadas para descrever a anisotropia de materiais hexagonais, os quais têm uma resposta magnetoelástica forte. Para o *Co* hcp, a anisotropia adicional devida a deformação da rede acarreta uma contribuição negligenciável em primeira ordem. No entanto, em segunda ordem tal contribuição é maior do que a constante de anisotropia magnetocristalina em segunda ordem.

Para estruturas cúbicas, tais como *Fe* bcc, *Co* fcc e *Ni* fcc, as contribuições adicionais da deformação da rede induzida por campo para a anisotropia são negligenciáveis. Tal ocorrência pode ser devida a alta simetria de um sistema cúbico e sua pequena resposta magnetoelástica.

Em poucas palavras, nós demonstramos que as contribuições magnetoelásticas em primeira e segunda ordem nas constantes de anisotropia não podem ser negligenciadas em muitas situações aplicando valores de filmes massivos para as constantes elásticas e os acoplamentos magnetoelásticos. Esses resultados permitem determinar os desvios de orientação da magnetização em materiais massivos e filmes finos, e verificar se correções devidas a deformação da rede induzida por campo são plausíveis para sistemas em escala nanométrica.

Trabalhos originados

B.1 Artigos submetidos para publicação

1. **Paes, V. Z. C.**, Graff, I. L., Varalda, J., Etgens, V. H., Mosca, D. H. The role of magnetoelastic and magnetostrictive energies in the magnetization process of MnAs epilayers grown on GaAs(001) and GaAs(111)B, submitted to Physical review B.
2. **Paes, V. Z. C.**, Mosca, D. H. Field-induced lattice deformation contribution to the magnetic anisotropy, submitted to Journal of Applied Physics.

B.2 Resumos publicados em anais de congressos

1. **PAES, V. Z. C.** ; MOSCA, D. H. ; Varalda, J. ; Graff, I.L. ; Etgens, V. H. . Experimental and simulations of magnetic hysteresis loops of MnAs epilayers on GaAs. In: **SBPMat2010, 2010**.
2. **PAES, V. Z. C.** ; Varalda, J. ; Graff, I.L. ; Etgens, V. H. ; MOSCA, D. H. . Simulations and magneto-elasticity of MnAs epilayers on GaAs. In: **First Sao Paulo School of Advanced Science: Spintronics and Quantum Computation, 2010, São Carlos**.
3. **PAES, V. Z. C.** ; Varalda, J. ; Graff, I.L. ; Etgens, V. H. ; MOSCA, D. H. . Phase Transition and Magnetoelasticity of MnAs epilayers on GaAs. In: **1ª Escola Nanomundo, 2010, Curitiba**.

Referências Bibliográficas

- [1] TANAKA, M., HARBISON, J. P., PARK, M. C., PARK, Y. S., SHIN, T., ROTHBERG, G. M. Epitaxial orientation and magnetic properties of MnAs thin films grown on (001) GaAs: Template effects. *Appl. Phys. Lett.* 65 (1994), 1964.
- [2] MENYUK, N., KAFALAS, J. A., DWIGHT, K., GOODENOUGH, J. B. Effects of Pressure on the Magnetic Properties of MnAs. *Phys. Rev.* 177 (1969), 942.
- [3] VON RANKE, P. J., GAMA, S., COELHO, A. A., DE CAMPOS, A., CARVALHO, A. M. G., GANDRA, F. C. G., DE OLIVEIRA, N. A. Theoretical description of the colossal entropic magnetocaloric effect: Application to MnAs. *Phys. Rev. B* 73 (2006), 014415.
- [4] MOSCA, D. H., VIDAL, F., ETGENS, V. H. Strain Engineering of the Magnetocaloric Effect in MnAs Epilayers. *Phys. Rev. Lett.* 101 (2008), 125503.
- [5] ZOU, J. D., WADA, H., SHEN, B. G., SUN, J. R., LI, W. Giant magnetocaloric effect and soft-mode magneto-structural phase transition in MnAs. *Europhysics Letters* 81 (2008), 47002.
- [6] CAMPUCH, C., DAS, A. K., NEY, A., DÄWERITZ, L., KOCH, R., PLOOG, K. H. Magnetologic with α -MnAs Thin Films. *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003), 147203.
- [7] KOCH, R. Unusual magnetic properties of MnAs thin films: A new approach to magnetologic computing. *Physica E* 25 (2004), 181.
- [8] NEY, A., HESJEDAL, T., CAMPUCH, C., MOHANTY, J., DAS, A. K., DÄWERITZ, L., KOCH, R., PLOOG, K. H. Magnetic out-of-plane component in MnAs/GaAs(001). *Appl. Phys. Lett.* 83 (2003), 2850.

- [9] F. SCHIPPAN, G. B., DÄWERITZ, L., PLOOG, K. H., DENNIS, B., NEUMANN, K.-U., ZIEBECK, K. R. A. Magnetic structure of epitaxially grown MnAs on GaAs(001). *J. Appl. Phys* 88 (2000), 2766.
- [10] MIRA, J., RIVADULLA, F., RIVAS1, J., FONDADO, A., GUIDI, T., CACIUFFO, R., CARSUGHI, F., RADAELLI, P. G., GOODENOUGH, J. B. Structural Transformation Induced by Magnetic Field and “Colossal-Like” Magnetoresistance Response above 313 k in MnAs. *Phys. Rev. Lett.* 90 (2003), 097203.
- [11] CHERNENKO, V. A., WEE, L., MCCORMICK, P. G., STREE, R. Giant magnetoelectric response in MnAs. *J. Appl. Phys.* 85 (1999), 7833.
- [12] RAMSTEINER, M., HAO, H. Y., KAWAHARAZUKA, A., ZHU, H. J., KÄSTNER, M., HEY, R., DÄWERITZ, L., GRAHN, H. T., PLOOG, K. H. Electrical spin injection from ferromagnetic MnAs metal layers into GaAs. *Phys. Rev. B* 66 (2002), 081304.
- [13] V. GARCIA, H. JAFFRÈS, M. E. M. M. V. H. E., GEORGE, J.-M. Resonant tunneling magnetoresistance in MnAs/III-V/MnAs junctions. *Phys. Rev. B* 72 (2005), 081303(R).
- [14] GARCIA, V., JAFFRÈS, H., GEORGE, J. M., MARANGOLO, M., EDDRIEF, M., ETGENS, V. H. Spectroscopic Measurement of Spin-dependent Resonant Tunneling through a 3D Disorder: The Case of MnAs/GaAs/MnAs Junctions. *Phys. Rev. Lett.* 97 (2006), 246802.
- [15] WIKBERG, J. M., KNUT, R., BHANDARY, S., DI MARCO, I., OTTOSSON, M., SADOWSKI, J., SANYAL, B., PALMGREN, P., TAI, C. W., ERIKSSON, O., KARIS, O., SVEDLINDH, P. Magnetocrystalline anisotropy and uniaxiality of MnAs/GaAs(100) films. *Phys. Rev. B* 83 (2011), 024417.
- [16] COELHO, L. N., NEVES, B. R. A., AES PANIAGO, R. M., VICENTIN, F. C., WESTFAHL, H., FERNANDES, R. M., IIKAWA, F., DÄWERITZ, L., SPEZZANI, C., SACCHI, M. Magnetic reconfiguration of MnAs/GaAs(001) observed by magnetic force microscopy and resonant soft x-ray scattering. *J. Appl. Phys.* 100 (2006), 083906.
- [17] RUNGGER, I., SANVITO, S. Ab initio study of the magnetostructural properties of MnAs. *Phys. Rev. B* 74 (2006), 024429.
- [18] IIKAWA, F., BRASIL, M. J. S. P., COUTO, O. D. D., ADRIANO, C., GILES, C., , DÄWERITZ, L. Effect of MnAs/GaAs(001) film accommodations on the phase-transition temperature. *Appl. Phys. Lett.* 85 (2004), 2250.

-
- [19] ADRIANO, C., GILES, C., COUTO, O. D. D., BRASIL, M. J. S. P., DÄWERITZ, L. ., IIKAWA, F. Strain redistribution at the phase transition of MnAs/GaAs(001) films. *Appl. Phys. Lett.* 88 (2006), 151906.
- [20] STONER, E., WOHLFARTH, E. P. A mechanism of magnetic hysteresis in heterogeneous alloys. *Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A* 240 (1949), 599.
- [21] GUIMARÃES, A. P. *Introdução ao nanomagnetismo*. CBPF, Rio de Janeiro, 2006.
- [22] MASON, W. P. *Phys. Rev.* 96 (1954), 302.
- [23] GUIMARÃES, A. P. *Magnetismo e ressonância magnética em sólidos*. Edusp, São Paulo, 2009.
- [24] NÉEL, L. *J. Phys. Rad.* 15 (1954), 376.
- [25] CHIKAZUMI, S. *Physics of Ferromagnetism*. Clarendon Press, Oxford, 1997.
- [26] OSBORN, J. A. Demagnetizing factors of the general ellipsoid. *Phys. Rev* 67 (1945), 351.
- [27] AHARONI. Demagnetizing factors for rectangular ferromagnetic prisms. *J. Appl. Phys* 83 (1998), 3432.
- [28] SKOMSKI, R., LIU, J. P., SELLMYER, D. J. Hysteresis-loop overskewing in the light of a novel nucleation mode. *J. Appl. Phys.* 87 (2000), 6334.
- [29] SKOMSKI, R., LIU, J. P., SELLMYER, D. J. Quasicoherent nucleation mode in two-phase nanomagnets. *Phys. Rev. B* 60 (1999), 7359.
- [30] KITTEL, C. Physical Theory of Ferromagnetic Domains. *Rev. Mod. Phys.* 21 (1949), 541.
- [31] KITTEL, C. Model of Exchange-Inversion Magnetization. *Phys. Rev.* 120 (1960), 335.
- [32] BRANTLEY, W. Calculated elastic constants for stress problems associated with semiconductor devices. *J. Appl. Phys.* 44 (1973), 534.
- [33] KOCH, R., PAMPUCH, C., YAMAGUCHI, H., DAS, A. K., NEY, A., DÄWERITZ, L., PLOOG, K. H. Magnetoelastic coupling of MnAs/GaAs(001) close to the phase transition. *Phys. Rev. B* 70 (2004), 092406.
- [34] YAMAGUCHI, H., DAS, A. K., NEY, A., HESJEDAL, T., PAMPUCH, C., SCHAADT, D. M., KOCH, R. From ferro- to antiferromagnetism via exchange-striction of MnAs/GaAs(001). *Europhys. Lett.* 72 (2005), 479.

- [35] KOCH, R., DAS, A. K., YAMAGUCHI, H., PAMPUCH, C., NEY, A. Perpendicular magnetic fields in cantilever beam magnetometry. *J. Appl. Phys.* 96 (2004), 2773.
- [36] TANNOUS, C., GIERALTOWSKI, J. A Stoner–Wohlfarth model Redux: Static properties. *Physica B* 403 (2008), 3563.
- [37] TANNOUS, C., GIERALTOWSKI, J. The Stoner–Wohlfarth model of ferromagnetism: static properties. *Eur. J. Phys.* 29 (2008), 475.
- [38] DOS SANTOS, M. C., GESHEV, J., SCHMIDT, J. E., TEIXEIRA, S. R., PEREIRA, L. G. Origin of the magnetization reversal of an fe thin film on si(111). *Phys. Rev. B* 61 (2000), 1311–1314.
- [39] HEUSLER, F. Z. *Angew. Angew. Chem.* 17 (1904), 260.
- [40] HILPERT, S., DIECKMANN, T. *Ber. Dtsch. Chem. Ges. A* 44 (1911), 2378.
- [41] SERRES, A. *J. Phys. Radium* 8 (1947), 146.
- [42] GUILLAUD, C. *J. Phys. Radium* 12 (1951), 233.
- [43] WILLIS, B. T. M., ROOKSBY, H. P. *Proc. Phys. Soc., London, Sect.*, 67 (1954), 290.
- [44] BEAN, C. P., RODBELL, D. S. Magnetic Disorder as a First-Order Phase Transformation. *Phys. Rev.* 126 (1962), 104.
- [45] DE BLOIS, R. W., RODBELL, D. S. *Phys. Rev.* 130 (1963), 1347.
- [46] MENYUK, M., KAFALAS, J. A., DWIGHT, K., GOODENOUGH, J. B. Effects of Pressure on the Magnetic Properties of MnAs. *Phys. Rev.* 177 (1969), 942.
- [47] WILSON, R. H., KASPER, J. S. The crystal structure of MnAs above 40c. *Acta Crystallogr.* 17 (1964), 95.
- [48] DÄWERITZ, L. Interplay of stress and magnetic properties in epitaxial MnAs films. *Rep. Prog. Phys.* 69 (2006), 2581.
- [49] NIRANJAN, M. K., SAHU, B. R., KLEINMAN, L. Density functional determination of the magnetic state of β -MnAs. *Phys. Rev. B* 70 (2004), 180406(R).
- [50] GRAFF, I. L., VIDAL, F., MARANGOLO, M., EDDRIEF, M., ZHENG, Y., ETGENS, V. H. Surface structure and magnetic properties of MnAs epilayers grown on vicinal GaAs(001) substrates. *J. Appl. Phys.* 106 (2009), 114319.
- [51] VIDAL, F., ETGENS, V. H., FERNANDES, V., SALLES, B. R., EDDRIEF, M. Ripple rotation in epitaxial growth of MnAs(1 $\bar{1}$ 100). *Phys. Rev. B* 121305(R) (2011), 83.

- [52] MATTOSO, N., EDDRIEF, M., VARALDA, J., OUERGHI, A., DEMAILLE, D., ETGENS, V. H. Enhancement of critical temperature and phases coexistence mediated by strain in MnAs epilayers grown on GaAs(111)b. *Phys. Rev. B* 70 (2004), 115324.
- [53] ENGEL-HERBERT, R., HESJEDAL, T., SCHAADT, D. M., DÄWERITZ, L., PLOOG, K. H. Micromagnetic properties of MnAs(0001)/GaAs(111) epitaxial films. *Appl. Phys. Lett.* 88 (2006), 052505.
- [54] ETGENS, V., EDDRIEF, M., MOSCA, D., MARANGOLO, M., GEORGE, J. Growth morphology and magnetism of MnAs/GaAs(001) epilayers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 226 (2001), 1577.
- [55] VIDAL, F., SPEZZANI, C., BREITWIESER, R., MARANGOLO, M., EDDRIEF, M., SACCHI, M., ETGENS, V. H. Tuning the period of elastic MnAs/GaAs(001) $\alpha - \beta$ pattern by Fe deposition. *Appl. Phys. Lett.* 97 (2010), 251914.
- [56] VARALDA, J., DE OLIVEIRA, A. J. A., OUERGHI, A., EDDRIEF, M., MARANGOLO, M., DEMAILLE, D., ETGENS, V. H., MATTOSO, N., MOSCA, D. H. Growth and magnetic properties of MnAs epitaxied on GaAs(111)b. *J. Appl. Physics* 100 (2006), 093524.
- [57] VIDAL, F., PLUCHERY, O., WITKOWSKI, N., GARCIA, V., MARANGOLO, M., ETGENS, V. H., BORENSZTEIN, Y. α - β phase transition in MnAs/GaAs(001) thin films: An optical spectroscopic investigation. *Phys. Rev. B* 74 (2006), 115330.
- [58] GARCIA, V., SIDIS, Y., MARANGOLO, M., VIDAL, F., EDDRIEF, M., BOURGES, P., MACCHEROZZI, F., OTT, F., PANACCIONE, G., ETGENS, V. H. Biaxial Strain in the Hexagonal Plane of MnAs Thin Films: The Key to Stabilize Ferromagnetism to Higher Temperature. *Phys. Rev. Lett.* (2007), 117205.
- [59] ENGEL-HERBERT, R., HESJEDAL, T., MOHANTY, J., SCHAADT, D. M., PLOOG, K. H. Magnetization reversal in MnAs films: Magnetic force microscopy, SQUID magnetometry, and micromagnetic simulations. *Phys. Rev. B* 73 (2006), 104441.
- [60] FERNANDES, R. M., JR., H. W., AES PANIAGO, R. M., COELHO, L. Domain wall formation and spin reorientation in finite-size magnetic systems. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 312 (2007), 314.
- [61] GUSTAVSSON, F., NORDSTRÖM, E., ETGENS, V. H., EDDRIEF, M., SJÖSTEDT, E., WÄPPLING, R., GEORGE, J.-M. Magnetic moment and anisotropy at the Fe/ZnSe(001) interface studied by conversion electron mössbauer spectroscopy. *Phys. Rev. B* 66 (2002), 024405.

- [62] DE BLOIS, R. W., RODBELL, D. S. Magnetic First-Order Phase Transition in Single-Crystal MnAs. *Phys. Rev.* 130 (1963), No. 4, 15.
- [63] HORCAS, I. Resonant cavity excitation system for radial array slab CO₂ lasers. *Rev. Sci. Instrum.* 78 (2007), 013705.
- [64] BREITWIESER, R., VIDAL, F., GRAFF, I. L., MARANGOLO, M., EDDRIEF, M., BOULLIARD, J.-C., ETGENS, V. H. Phase transition and surface morphology of MnAs/GaAs(001) studied with in situ variable-temperature scanning tunneling microscopy. *Phys. Rev. B* 80 (2009), 045403.
- [65] LINDNER, J., TOLINSKI, T., LENZ, K., KOSUBEK, E., WENDE, H., BABERSCHKE, K., NEY, A., HESJEDAL, T., PAMPUCH, C., KOCH, R., DÄWERITZ, L., PLOOG, K. Magnetic anisotropy of MnAs-films on GaAs(001) studied with ferromagnetic resonance. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 277 (2004), 159.
- [66] LLAMAZARES, A. R., MILANO, J., L.B. STEREN AND, V. G., MARANGOLO, M., EDDRIEF, M., ETGENS, V. Ferromagnetic resonance study of MnAs/GaAs(111) thin films. *Physica B* 398 (2007), 372.
- [67] KOHNKE, H., KLEEGER, C., DANKELMANN, V., BÄRNER, K., SCHÜNEMANN, J. Anisotropic magnetization of some ferromagnetic and canted transition metal pnictides. *Journal of Alloys and Compounds* 239 (1996), 150.
- [68] PLAQUE, T., HESJEDAL, T., MOHANTY, J., KÄSTNER, M., DÄWERITZ, L., PLOOG, K. H. Understanding the submicron domain structure of MnAs thin films on GaAs(001): Magnetic force microscopy measurements and simulations. *Appl. Phys. Lett* 84 (2004), 1132.
- [69] DÖRFLER, M., BÄRNER, K. The elastic constants of MnAs. *Phys. Status Solidi A* 17 (1973), 141.
- [70] MANAGO, T., KURAMOCHI, H., AKINAGA, H. Thickness dependence of magnetic domains of MnAs films. *Surface Science* 600 (2006), 4155.
- [71] CIRIA, M., ARNAUDAS, J. I., BENITO, L., DE LA FUENTE, C., DEL MORAL, A., HA, J. K., O'HANDLEY, R. C. Magnetoelastic coupling in thin films with weak out-of-plane anisotropy. *Phys. Rev. B* 67 (2003), 024429.
- [72] PREISACH, F. Über die magnetische Nachwirkung. *Zeitschrift für Physik* 94 (1935), 277.
- [73] ENGEL-HERBERT, R., HESJEDAL, T. Magnetic coupling of ferromagnetic stripe arrays: Analytical model for the α - β -phase coexistence regime of MnAs/GaAs(001). *Phys. Rev. B* 78 (2008), 235309.

-
- [74] ZHANG, J., HEITMANN, A., ALPAY, S., ROSSETTI, G. Electrothermal properties of perovskite ferroelectric films. *Journal of Materials Science* 44, 5263–5273.
- [75] VALIEV, E., VORONIN, V. Isotropic magnetoelastic interaction in hexagonal ferromagnets. *The Physics of Metals and Metallography* 101, 242–246.
- [76] LEE, S., PIROGOV, A., M.KANG, JANG, K.-H., YONEMURA, M., KAMIYAMA, T., CHEONG, S.-W., GOZZO, F., N.SHIN, KIMURA, H., NODA, Y., PARK, J.-G. *Nature* 451 (2008), 805.
- [77] SANDER, D. The correlation between mechanical stress and magnetic anisotropy in ultrathin films. *Reports on Progress in Physics* 62, 5, 809.
- [78] SANDER, D. *J. Phys.: Condens. Matter* 16 (2004), R603–R636.
- [79] NAVAS, D., NAM, C., VELAZQUEZ, D., ROSS, C. A. Shape and strain-induced magnetization reorientation and magnetic anisotropy in thin film ti/cocrpt/ti lines and rings. *Phys. Rev. B* 81 (Jun 2010), 224439.
- [80] PROKOP, J., VALDAITSEV, D. A., KUKUNIN, A., PRATZER, M., SCHÖNHENSE, G., ELMERS, H. J. Strain-induced magnetic anisotropies in co films on mo(110). *Phys. Rev. B* 70 (Nov 2004), 184423.
- [81] HA, K., O'HANDLEY, R. C. *J. Appl. Phys.* 85 (1999), 5282–5284.
- [82] BENITO, L., ARNAUDAS, J. I., CIRIA, M., DE LA FUENTE, C., DEL MORAL, A., WARD, R. C. C., WELLS, M. R. Magnetocrystalline and magnetoelastic basal plane anisotropies in HoLu superlattices. *Phys. Rev. B* 70 (Aug 2004), 052403.
- [83] O'HANDLEY, R. C., SUN, S. W. *J. Magn. Magn. Mater.* 1717 (1992), 104–107.
- [84] KOCH, R., WEBER, M., THURMER, K., RIEDER, K. *J. Magn. Magn. Mater.* L11 (1996), 159.
- [85] GUTJAHR-LÖSER, T., SANDER, D., KIRSCHNER, J. *J. Magn. Magn. Mater.* L1 (2000), 220.
- [86] WEST, F. G. *J. Appl. Phys.* 35 (1964), 1827.
- [87] PAES, V. Z. C., GRAFF, I. L., VARALDA, J., ETGENS, V. H., MOSCA, D. H. *submitted to Physical Review B*.
- [88] RATIQUE, S., CULLEN, J. R., WUTTIG, M., CUI, J. *J. Appl. Phys.* 95 (2004), 6939.

-
- [89] DEAN, J., BRYAN, M. T., MORLEY, N. A., HRKAC, G., JAVED, A. *J. Appl. Phys.* *110* (2011), 043902.
- [90] PETCULESKO, G., HATHAWAY, K. B., LAGROSSO, T. A., WUN-FOGLE, M., CLARK, E. A. *J. Appl. Phys.* *97* (2005), 10M315.
- [91] WUTTIG, M., DAI, L., CULLEN, J. *Appl. Phys. Lett.* *80* (2002), 1135.
- [92] ATULASIMHA, J., FLATAU, A. B. *Smart Mater. Struct.* *20* (2011), 043001.
- [93] CLARK, A. E., WUN-FOGLE, M., RESTORFF, J. B., LOGRASSO, T. A. *Smart Materials-Fundamentals and Applications* *43* (2002), 881–886.